

**Universidade Estadual de Campinas
UNICAMP**

Faculdade de Engenharia Química

**Área de Concentração: Desenvolvimento de
Processos Químicos**

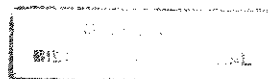
**Projeto e Operação de Reatores
Auxiliados por Computador**

Autor: Eng^o Antonio Carlos Papes Filho

Orientador: Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia
Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do
título de Mestre em Engenharia Química

Campinas - SP
Abril de 1999



UNIDADE	BC
N.º CHAMADA	
V.	Ex.
	38233
	229199
	R\$ 11,00
	10/08/99
N.º CPD	

CM-00134283-3

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

P197p Papes Filho, Antonio Carlos
Projeto e operação de reatores auxiliados por
computador. / Antonio Carlos Papes Filho.--Campinas,
SP: [s.n.], 1999.

Orientador: Rubens Maciel Filho
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Engenharia concorrente. 2. Inteligência artificial.
3. Redes neurais (Computação). 4. Reatores químicos –
Simulação (Computadores). I. Maciel Filho, Rubens. II.
Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
Engenharia Química. III. Título.

Universidade Estadual de Campinas
Faculdade de Engenharia Química
Área de Concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Projeto e Operação de Reatores

Auxiliados por Computador

Esta versão corresponde à redação final da dissertação de mestrado, defendida pelo **Engº. Antonio Carlos Papes Filho**, e aprovada pela comissão julgadora em 23 / 04 /1999.



Prof. Dr. Rubens Maciel Filho
Orientador

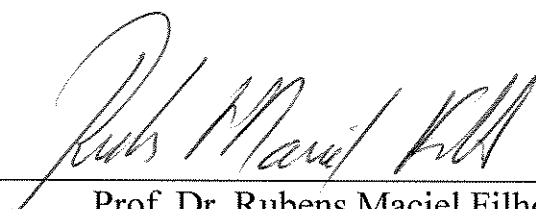
Campinas - SP
Abril de 1999

Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP

Faculdade de Engenharia Química – FEQ

Área de Concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Dissertação de Mestrado defendida e aprovada em 23 de abril de 1999 pela banca examinadora constituída pelos professores doutores:



Prof. Dr. Rubens Maciel Filho
Orientador



Prof.ª. Dr.ª. Liliane Maria Ferrareso Lona Batista



Prof. Dr. Roberto de Campos Giordano

Campinas - SP
Abril de 1999

Às minhas avós,
Nena e Idmer,
com muito carinho.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ...

Ao Prof. Dr. Rubens Maciel Filho pelo convite para participar deste projeto e pela sua valiosa orientação ao longo de todo o trabalho.

Aos meus pais, Cleide e Carlos, pelo apoio e carinho, e por estarem sempre presentes em minhas conquistas.

A Juliana por estar sempre ao meu lado, partilhando não só das conquistas mas também das dificuldades, e me ajudando a superá-las.

A FAPESP pelo apoio financeiro concedido e pela valiosa contribuição dos assessores por meio dos pareceres dos relatórios.

Ao meu irmão, Fábio, pela sua contribuição como biólogo nesta dissertação.

ÍNDICE

RESUMO	1
ABSTRACT	2
1. INTRODUÇÃO E ORGANIZAÇÃO DA TESE	3
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E CONCEITOS FUNDAMENTAIS	6
2.1. Introdução	6
2.2. Reatores de leito fixo	6
2.3. Engenharia co-corrente	8
2.4. Inteligência Artificial	11
2.4.1. Aspectos gerais	11
2.4.2. Sistemas inteligentes	14
2.4.3. Aplicações de IA em engenharia	15
2.4.4. O que são redes neurais artificiais?	16
2.4.5. Histórico das redes neurais	17
3. TEORIA - REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	20
3.1. Os neurônios orgânicos	20
3.2. Os neurônios virtuais	22
3.2.1. Número de neurônios em cada camada	25
3.3. Implementação	26
3.3.1. Calculando os dados de saída	26
3.3.2. Treinando a rede neural	28
3.3.3. A retropropagação	29
3.3.4. Algoritmo exemplificado passo-a-passo	33
3.3.5. Tópicos extras	36
3.3.6. Advertências	38
4. APRESENTAÇÃO DO SISTEMA DE SOFTWARES	39
5. SIMULAÇÃO DO REATOR	44
6. TREINAMENTO DA REDE NEURAL	50
6.1. Parâmetros iniciais	50
6.1.1. Variáveis de entrada e saída	50
6.1.2. Apresentação dos dados à rede	52
6.2. Treinamento generalizado	52
6.3. Treinamento orientado	55

7. SISTEMA ESPECIALISTA	59
7.1. Equilíbrio químico	59
7.2. Estudo das variáveis de operação	62
7.3. Alarmes	63
7.3.1. Alarme de degradação de catalisador	64
7.3.2. Alarme de risco de explosão	64
7.3.3. Alarme de alta queda de pressão	64
7.3.4. Alarme de baixa conversão	64
7.4. Estudo de risco de explosão	64
7.5. Estudo de variáveis de projeto	65
7.6. Cálculo da condição de não-degradação do catalisador	66
8. UNIDADE DE SEPARAÇÃO	67
9. RESULTADOS E DISCUSSÃO	69
9.1. Simulação principal do reator	69
9.2. Parâmetros para o sistema especialista	77
9.3. Estudo das variáveis de operação e projeto	78
9.3.1. Configuração co-corrente	79
9.3.2. Configuração contra-corrente	82
9.4. Análise da simulação	98
9.4.1. Configuração co-corrente	98
9.4.2. Configuração contra-corrente	101
9.5. Unidade de separação	104
10. CONCLUSÕES	108
11. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	112

GLOSSÁRIO

Engenharia Co-corrente

Área do conhecimento que estuda metodologias para realizar um conjunto de tarefas de forma integrada, de modo a atingir um determinado objetivo com máxima eficiência. Neste tipo de atividade, há alta troca de informações entre os objetos das diferentes tarefas (quer sejam pessoas, quer sejam softwares), possibilitando a realização de atividades paralelas, obtendo-se o resultado desejado em menor tempo.

Inteligência Artificial

É parte da ciência relacionada ao projeto de sistemas computacionais inteligentes, que exibem características associadas com inteligência do comportamento humano. Ela divide-se em três grandes áreas de investigação: robótica (concentrada na obtenção de máquinas com atributos físicos e mentais dos seres humanos); ciência cognitiva (trata do estudo dos processos do pensamento) e sistemas inteligentes. Esta última área busca o desenvolvimento de sistemas computacionais que imitam o conhecimento humano em áreas restritas, como engenharia, medicina, ensino, sistemas de transportes, jogos.

Redes Neurais Artificiais (RNA)

Encontram-se dentro da área de Inteligência Artificial à medida que representam um modelo matemático de como os neurônios funcionam. As RNA consistem de uma nova abordagem para o ajuste de dados, com larga aplicabilidade e facilidade de lidar com problemas altamente não lineares e complexos. Um conjunto de dados de entrada e saída é apresentado à rede num processo denominado treinamento, dando início a uma sequência de iterações para o ajuste dos parâmetros da rede (chamados pesos), até que ela capte a essência dos dados e seja capaz de predizê-los. Este treinamento imita o processo de aprendizado básico do ser humano, da mesma forma como as crianças aprendem a reconhecer formas e cores.

RESUMO

Neste trabalho, desenvolveu-se um sistema de softwares para auxiliar a operação e projeto de reatores (CAD - Computer Aided Design), buscando fornecer uma ferramenta para operadores e engenheiros de modo a prever o comportamento do sistema quando há um desvio no processo, reestabelecer com rapidez as condições normais, definir políticas operacionais e auxiliar o projeto destes equipamentos.

Um software em Borland C++, empregando técnicas de Inteligência Artificial (“rule-based”), atua como um Sistema Especialista, guiando o usuário na simulação do reator. Este programa controla o conjunto de softwares e realiza automaticamente um estudo do sistema através de diversas simulações, fornecendo os resultados de uma forma facilmente compreensível.

Utilizou-se um software em Fortran para a simulação do reator, empregando um modelo matemático determinístico, unidimensional e pseudo-homogêneo. Os conceitos de sensibilidade paramétrica serão utilizados neste simulador para quantificar a estabilidade térmica do reator. A taxa de reação foi estimada através de um algoritmo de redes neurais artificiais (RNA), empregando-se um software em Fortran para realizar o treinamento da rede. A elaboração do software de treinamento e o processo de treinamento serão detalhados neste trabalho.

A unidade de separação dos produtos de reação e troca térmica, também será englobada, utilizando-se o software comercial Hysim para sua simulação, de forma integrada com o sistema de softwares.

Como caso estudo, para fins de implementação computacional, será considerada a planta para a produção de acetaldeído pela oxidação do etanol sobre catalisador de Fe-Mo.

A interação harmônica entre os diferentes softwares utilizados neste trabalho para realizar a simulação do processo com maior eficiência enquadra-se na área de pesquisa conhecida como engenharia co-corrente (“concurrent engineering”).

ABSTRACT

In this work, it was developed a system of softwares in order to aid chemical reactor operation and design (CAD - Computer Aided Design), trying to provide an important tool for operators and engineers to:

- predict system behavior when there is a process deviation;
- return quickly to normal conditions;
- define operational policies;
- aid equipment design.

A Borland C++ software, using Artificial Intelligence techniques (rule-based), acts as an Expert System, guiding the user through reactor simulation. This program controls the software system and executes itself a system study, making many simulations and providing results in an easily comprehensible form.

It was used a Fortran software to simulate the reactor, based on a deterministic, unidimensional and pseudo-homogeneous mathematical model. Parametric sensivity concepts were used to quantify chemical reactor thermal stability. The rate of reaction was estimated by a neural network algorithm, using a Fortran software to train the net. The software construction and the training process will be discussed in this work.

The simulation of reactor products separation unity and heat exchangers will also be discussed, using the commercial simulator Hysim, linked to the software system..

As a case-study, for computing ends, it will be considered an acetaldehyde plant, by ethanol oxidation over Fe-Mo catalyst.

The harmonical interaction among the different softwares used in this work, in order to achieve maximum efficiency of process simulation, is part of concurrent engineering study area.

1. INTRODUÇÃO

Reatores químicos estão entre os equipamentos mais importantes dos processos industriais. De fato, em processos onde reações químicas ocorrem na obtenção de um produto desejado, o desempenho global do processo irá depender do desempenho operacional do reator. Para uma determinada planta, reatores operados fora dos padrões acarretam em menores produtividades e ações excessivas das unidades de separação (colunas de destilação, por exemplo) e/ou reciclo de reagentes não-convertidos.

Para o desenvolvimento do projeto conceitual de uma planta química é conveniente ter uma representação adequada para descrever os fenômenos que ocorrem a nível dos reatores químicos.

Os simuladores comerciais têm atualmente poucas facilidades e recursos que possibilitem uma simulação adequada dos reatores químicos e isto tem dificultado e mesmo proibido simulações rigorosas de processos químicos que possuem reatores, especialmente os de leito fixo. Normalmente, os simuladores não permitem a simulação destes equipamentos, ou quando o fazem, supõem considerações que simplificam demasiadamente o problema, levando a resultados não satisfatórios.

Assim sendo, passa a ser de grande interesse o desenvolvimento de softwares que permitam a integração de programas de computador para a solução de modelos matemáticos de reatores químicos com outros ambientes, principalmente com os simuladores comerciais.

Com vistas neste cenário, desenvolveu-se um sistema de softwares coordenado por um Sistema Especialista, encarregado de realizar uma análise inteligente do processo, guiar o usuário na sua simulação, e executar de forma harmônica os softwares envolvidos — simulador do reator (Fortran) e o simulador da unidade de separação e troca térmica (Hysim). Este tipo de atividade pode ser enquadrado como um requisito importante para o desenvolvimento de projeto auxiliado por computador e também é assunto integrante da área de “engenharia co-corrente”.

Durante os últimos 10 anos, várias técnicas avançadas para modelagem e controle de processos invadiram as indústrias químicas, petroquímicas e de manufatura. Além da “lógica fuzzy”, estas técnicas incluem também as **redes neurais artificiais**.

Antes confinadas ao meio intelectual como um conceito obscuro, as redes neurais foram lentamente entrando no mundo industrial, como foi o caso da DuPont, Eastman Kodak e Texaco. Neste trabalho, empregou-se as redes neurais para prever a taxa de reação a um determinado valor de conversão, temperatura e pressão no reator. Normalmente, dispense-se considerável esforço intelectual no intuito de desenvolver um modelo matemático fisicamente consistente para ajustar dados experimentais de taxa de reação em função destas variáveis. Com o modelo em mãos (muitas vezes uma equação complexa), parte-se para a elaboração do software para simulação de um reator.

Como a forma matemática da equação da taxa difere significativamente de uma reação química para outra, um software de simulação para um dado reator (leito fixo, por exemplo) é específico para uma certa reação química. Se for necessário simular um outro sistema (outra reação química) para o mesmo reator, é preciso reeditar o programa-fonte e modificar as linhas referentes à equação da taxa adaptando-as ao novo sistema. Para contornar este inconveniente, foram empregadas as redes neurais para substituir a equação da taxa. Assim, o programa de simulação do reator não precisará ser editado e os parâmetros para a rede neural, particulares para cada reação, poderão ser modificados em um arquivo de dados separado. Para treinar a rede neural, desenvolveu-se um software em Fortran, determinando-se então os parâmetros da rede para a reação química estudada.

Organização da tese

O Capítulo 1 apresenta a introdução da tese, posicionando o trabalho no contexto geral da engenharia.

O Capítulo 2 contém uma revisão bibliográfica sobre os assuntos relativos ao trabalho: reatores de leito fixo, engenharia co-corrente, inteligência artificial e redes neurais.

A teoria sobre as redes neurais artificiais é apresentada no Capítulo 3, juntamente com o algoritmo exemplificado.

No Capítulo 4, encontra-se uma vista geral do sistema de softwares desenvolvido, e uma descrição do processo estudado. Através de um diagrama esquemático, mostra-se o fluxo de informações entre os diferentes softwares, além dos fluxos de entrada e saída de dados.

O Capítulo 5 traz os detalhes da simulação do reator, como equações de balanço, método de resolução e uma descrição do conceito de sensibilidade paramétrica, utilizado para quantificar a estabilidade térmica do reator.

O processo de treinamento da rede neural é apresentado no Capítulo 6, discutindo-se as etapas envolvidas, as duas abordagens estudadas e os parâmetros otimizados.

O Capítulo 7 é dedicado ao Sistema Especialista, detalhando-se cada um de seus módulos: equilíbrio químico, estudo das variáveis de operação, alarmes/segurança, estudo das variáveis de projeto e cálculo da condição de não degradação do catalisador.

No Capítulo 8, discute-se o sistema de separação dos produtos do reator e a simulação das unidades de separação e troca térmica com o software comercial Hysim.

O Capítulo 9 traz os resultados do trabalho, mostrando os perfis no reator e as análises do Sistema Especialista, sempre comparando os valores fornecidos pela rede neural com aqueles calculados pela equação da taxa.

Finalmente, o Capítulo 10 condensa as conclusões deste projeto e apresenta as sugestões para trabalhos futuros.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E CONCEITOS FUNDAMENTAIS

2.1. INTRODUÇÃO

Os principais conceitos abordados no trabalho foram pesquisados na literatura e apresentados neste capítulo: reatores de leito fixo, engenharia co-corrente, inteligência artificial, redes neurais artificiais e sistemas inteligentes.

2.2. REATORES DE LEITO FIXO

A oxidação catalítica do etanol a acetaldeído sobre catalisador de cobre oxidado foi estudada por Moura (1984)^[2]. A partir da montagem experimental deste trabalho, Maciel Filho (1984)^[3] levantou dados cinéticos da oxidação catalítica do etanol a acetaldeído sobre Fe-Mo oxidado. Estes dados foram tratados através de um mecanismo reacional baseado no método de Temkin, sendo deste modo obtido o modelo cinético da oxidação do etanol a acetaldeído. Este apresenta uma equação da taxa complexa, seguindo a lei de Arrhenius^[4].

Na literatura, grande parte dos trabalhos sobre modelagem de reatores de leito fixo são baseados em um modelo pseudo-homogêneo considerando uma cinética simples para a reação catalítica, dentre os quais podem ser citados: Welsenaere & Fromment (1970)^[5], Hosten & Fromment (1986)^[6], Borio et al. (1989)^[7] e outros.

Entretanto, na prática industrial, geralmente as reações químicas apresentam uma taxa de reação complexa e os modelos da literatura não se ajustam satisfatoriamente ao processo real para toda a faixa de operação. Assim, as principais deficiências na modelagem dos processos catalíticos com reatores de leito fixo se devem ao fato de que as cinéticas químicas são incompletas ou imprecisas.

A maior parte dos processos catalíticos envolvendo reagentes gasosos fazem uso de reatores de leito fixo, o qual consiste de um tubo cilíndrico preenchido por partículas de

catalisador com o reagente escoando através deste meio poroso. Este tipo de reator apresenta baixo custo de construção, de operação e manutenção, sendo por isso largamente utilizado e, atualmente, tem sido considerado conveniente para a redução de emissões de poluentes, desde que adequadamente projetado^[8].

Para processos onde a reação química é extremamente exotérmica ou requer altas pressões, a utilização de um reator de leito fixo se torna indispensável para minimizar o custo econômico do processo.

As dificuldades relacionadas com o uso deste tipo de reator se devem ao fato de a temperatura em seu interior não ser uniforme ao longo do comprimento do tubo e a maior parte da reação ocorrer nas proximidades da entrada, se as condições de projeto e operação não forem adequadamente escolhidas.

Em reatores não adiabáticos, a temperatura do leito pode ser muito diferente da temperatura na parede, aumentando a taxa de reação local^[9,10]. Os efeitos térmicos podem ser reduzidos controlando-se a variação da temperatura e vazão do fluido refrigerante, o que permite também controlar a temperatura interna do reator.

Uma maneira bastante apropriada para avaliar o comportamento do sistema quando diferentes projetos e procedimentos operacionais são utilizados, é aquela através da simulação por computador. O progresso dos métodos numéricos e o aperfeiçoamento dos modelos matemáticos contribuíram para uma modelagem mais rigorosa dos reatores, de forma que resultados mais confiáveis possam ser obtidos.^[4]

2.3. ENGENHARIA CO-CORRENTE

As plantas de processo modernas podem ser encaradas como controladas sob três níveis: controle do processo (tipicamente através de um sistema distribuído - SDCD), supervisão pelos operadores (que lida com problemas excepcionais) e manuseio de dados (que relaciona-se com os relatórios e operação das informações de gerenciamento). Uma grande mudança tem ocorrido no papel dos operadores, que evoluiu de uma responsabilidade direta com o controle para uma posição de supervisão, ou seja, monitorar e analisar todas as informações que estão agora a cargo do sistema de controle. A atenção dos operadores está mudando no sentido de identificar situações anormais e determinar quais ações devem ser tomadas quando “as coisas vão mal”. Isto exige considerável experiência por parte dos operadores e uma grande compreensão do processo. Devido à grande quantidade de dados coletados por um SDCD (Sistema Digital de Controle Distribuído) moderno, mesmo operadores experientes têm dificuldade de assimilar as informações para atuar rapidamente e isto tende a gerar uma sobrecarga mental, e este é, hoje em dia, o fator limitante na velocidade de resposta.

Este quadro encorajou o desenvolvimento de sistemas inteligentes de diagnóstico e avaliação de qualidade, juntamente com bancos de dados de suporte para ajudar na tomada de decisões. Os sistemas de Suporte a Decisões podem ser usados para fornecer um diagrama intelectual para aprimorar a tomada de decisões.

Wang, Lu e McGreavy^[11], desenvolveram um destes sistemas para uma unidade de destilação de óleo cru. Em uma planta de processo (no caso, a unidade de destilação), a produção deve ser mantida na meta, frente às inevitáveis alterações nas matérias-primas, além das contínuas mudanças no mercado consumidor, que forçam as unidades a suprir a demanda por uma certa gama de produtos. Para responder a estas mudanças, é necessário estabelecer uma estratégia operacional de modo a alterar o processo rápida e seguramente para novas condições de operação, preferivelmente através de um “caminho ótimo”, minimizando as perdas de produto durante a mudança.

Mesmo quando o processo está operando normalmente, situações anormais podem surgir resultando em aumento do custo operacional, uma parada ou em situações de risco, como um incêndio ou explosão. A detecção prematura destas situações e o rápido diagnóstico de falhas requer uma introspecção na performance operacional e tudo o que ajudar nesta tarefa é claramente vantajoso.

Técnicas qualitativas e quantitativas em muitos processos, como banco de dados de propriedades, procedimentos de otimização, simulação dinâmica e em estado-estacionário e sistemas de treinamento de operação estiveram em alta por algum tempo. Mais recentemente, técnicas de inteligência artificial foram adaptadas para auxiliar o uso de outras técnicas cooperativamente e têm sido especialmente úteis no aumento da velocidade de atuação (resposta) dos operadores. Para este procedimento ser eficiente, é necessário fornecer informações aos operadores de uma forma apropriada e a um correto nível de detalhe. Deste modo, utilizando o exemplo de uma unidade de destilação, quando ocorre uma mudança na matéria-prima ou na especificação do produto, é necessário considerar a hidráulica interna do prato para avaliar a performance geral e entender o que está acontecendo.

Um outro campo bastante visado por estas novas técnicas é o biotecnológico. A inerente variabilidade presenciada nos sistemas biológicos força desvios dos procedimentos operacionais, geralmente necessitando de modificações nos padrões operacionais pré-estabelecidos em resposta à variação na performance. Sem modificação na operação, há uma inevitável perda de produtividade, portanto, em bioprocessos mais maduros, as melhorias na supervisão e controle são vistas como um meio de reduzir a variabilidade do processo, aumentando a rentabilidade. A formulação de um sistema de controle eficaz geralmente requer um eficiente uso de todo o conhecimento em torno do processo em questão. Metodologias de Inteligência Artificial em conjunto com técnicas de reconhecimento de padrões (como as Redes Neurais) e outras técnicas bem estabelecidas de modelagem e controle, estão permitindo o desenvolvimento de Sistemas Supervisórios Inteligentes (SSI), contribuindo na obtenção destes objetivos. Ignota et al^[12] descreveram alguns elementos utilizados no desenvolvimento de um SSI para fermentação industrial de penicilina.

A maioria dos autores têm utilizado a Engenharia Co-corrente Auxiliada por Computador para o desenvolvimento de ambientes computacionais que permitam a ação cooperativa de grupos de engenharia multidisciplinares, trabalhando em diferentes locais, na realização de todo um projeto, fornecendo uma plataforma de trabalho para explorar aspectos de operação e gerenciamento. Com este ambiente, todos têm acesso às ferramentas necessárias para que possam solucionar seus problemas sem a necessidade de gerenciar e manter grandes volumes de dados. Isto requer a integração de todas as atividades especialistas, como mecânica, civil e projeto de controle, de modo que todos os aspectos (incluindo segurança, impacto ambiental, custo e operabilidade) possam ser considerados o mais cedo possível, reduzindo-se o tempo para a conclusão do projeto.

Como um exemplo, suponha que exista um pacote aplicativo que execute o projeto e simulação de uma coluna de destilação. Após a equipe de processos completar os cálculos e conferir os resultados, a atividade será suspensa e o banco de dados disponibilizado para os demais grupos de projeto. No grupo de projeto de equipamentos, há um aplicativo que executa o projeto do prato e para isso, necessita de dados do grupo de processo, incluindo fluxogramas e propriedades físicas das substâncias. O grupo de equipamentos confere a disponibilidade e encontra os dados no banco global, ativando então o programa de projeto do prato. Discussões e negociações são feitas diretamente entre os grupos, havendo tanto tarefas paralelas quanto sequenciais, coordenadas por um gerente de projetos numa posição hierárquica superior. Num ambiente computacional, a coordenação pode ser aperfeiçoada aplicando-se uma “base de conhecimento” (técnica de Inteligência Artificial) ao sistema.

McGravy et al.^[13] desenvolveram um destes ambientes para projeto utilizando um modelo multidimensional orientado ao objeto, baseado no STEP^[14], oferecendo benefícios de modelagem de dados, compartilhamento de informações e comunicação, e cooperação entre grupos de projeto.

Este conceito de Engenharia Co-corrente expandiu-se no campo da simulação de processos, indo além do gerenciamento de informações entre grupos de projeto. Neste trabalho, aplicou-se o conceito em um conjunto de softwares, promovendo-se a troca de dados entre eles de modo que pudessem ser executados simultaneamente e de forma harmônica, com o objetivo de simular um dado processo com maior eficiência, extraindo-se dele o máximo de informação.

2.4. INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL

2.4.1. Aspectos Gerais

A questão “o que é a Inteligência Artificial?” tem sido debatida por muitos anos e ainda não existe uma definição formal. O objetivo da Inteligência Artificial (abreviada neste texto como AI) no fundo é fazer os computadores “pensar”, para solucionar problemas que requerem a inteligência humana.

Com base nesta idéia, muitos autores procuraram definir a IA^[15]:

O estudo de como fazer os computadores executar coisas que, no momento, pessoas fazem melhor (Rich e Knight, 1991).

Inteligência Artificial é parte da ciência da computação relacionada ao projeto de sistemas computacionais inteligentes, isto é, que exibem características que nós associamos com inteligência no comportamento humano (Barr e Feigenbaum, 1981).

Inteligência Artificial é o ramo da ciência da computação que lida com métodos simbólicos e não-algorítmicos de solução de problemas (Buchanan e Shortliffe, 1983).

Na figura 1, encontra-se um breve histórico dos avanços em IA.

Figura 1: Eventos importantes na história moderna da IA^[16].

1936	Turing formaliza a noção de um computador para propósitos gerais.
1945	von Neumann concebe o projeto de um “programa armazenado” para computadores seriais digitais.
1946	ENIAC, o primeiro computador digital para propósitos gerais é implementado.
1950	Turing descreve seu teste para inteligência de máquinas. Shannon começa a especular sobre programas de xadrez.
1955	Bernstein desenvolve o primeiro programa de xadrez.
1956	McCarty organiza a Conferência de Dartmouth e cunha o termo <i>inteligência artificial</i> . Newel, Shaw e Simon desenvolvem a Teorística Lógica, o primeiro programa de sucesso em IA.
1967	McCarty inventa o Lisp (LISt Processor), a primeira linguagem de IA popular. Newel, Shaw e Simon iniciam o ambicioso “General problem Solver”. Chomsky introduz a gramática transformacional para modelar a sintaxe de linguagens naturais.
1965	Feigenbaum desenvolve o Dendral, o primeiro sistema inteligente. Dreyfus publica “Alquimia e Inteligência Artificial”.
1966	Quillian inventa a rede semântica.
1967	Greenblatt desenvolve MacHack, o primeiro programa de xadrez competente.
1970	Winston, em “Aprendendo Descrições Estruturais por Exemplos”, inaugura o aprendizado de máquina. Colmerauer inventa a linguagem de IA Prolog.
1972	MYCIN, o primeiro sistema inteligente a usar regras de produção, é desenvolvido. Winograd completa o programa de processamento de linguagem natural, SHRDLU.
1974	Minsky publica “Um Diagrama para Representar Conhecimento”.
1975	A Máquina Lisp, o primeiro computador especializado em IA, é inventado no MIT. O primeiro PC é vendido.
1982	Publicada a teoria compreensiva da visão, por Marr. A pesquisa japonesa “Quinta Geração” começa.
1986	Thinking Machine Corporation introduz a Máquina de Conexão. HiTech, de Berliner, é a primeira máquina a receber o título de mestre em xadrez. O primeiro micro de 32 bits torna-se amplamente disponível.

Segundo Chabris^[16], IA é muito mais que sistemas inteligentes, e a considera uma ciência interdisciplinar composta de três áreas de investigação relacionadas:

1. **Robótica:** Aqui, não significando automação industrial, sentido tátil ou planejamento de movimentos, mas sim um programa de pesquisa geral, cujo objetivo final é a construção, por algum meio disponível, de uma simulação artificial completa de um ser humano, presumidamente incluindo tanto atributos físicos quanto mentais. Parece que muitos oponentes da IA têm escolhido este alvo para as críticas, devido a sérias implicações sociais e filosóficas. Os objetivos deste ramo estão ainda longe de serem atingidos, mesmo após décadas de pesquisa.

2. **Ciência Cognitiva:** Trata do estudo da cognição, ou seja, processos de pensamento, estruturas e mecanismos usados pelos seres humanos. Muitos psicólogos trabalhando nesta área usam modelos computacionais de inteligência para auxiliá-los a aprender mais sobre o cérebro.

3. **Softwares Inteligentes:** A priori, consiste em tornar sistemas computacionais existentes mais espertos, apresentando comportamento inteligente.

A pesquisa aplicada em IA concentra-se em diferentes áreas, mais notadamente em :

⇒ Processamento Natural da Linguagem: a ação sendo realizada por um programa computacional que pode aceitar entradas não-triviais em uma linguagem humana. Atualmente, muito progresso tem sido feito nos processadores de texto que dispensam o uso de um teclado, compondo um texto na tela a partir de palavras ditadas pelo usuário.

⇒ Sistemas Inteligentes: criação de programas computacionais que imitam a habilidade humana em um restrito campo de conhecimento, resolvendo problemas de grande complexidade. Em teoria, por um processo chamado *engenharia do conhecimento*, um grupo de engenheiros do conhecimento extraem toda a informação possível de engenheiros experientes em certa área e implementam tais conhecimentos no computador. Estes sistemas têm dois atributos primários: o primeiro permite que sejam inseridas informações sobre um determinado assunto, algumas vezes, chamadas de “Base de Conhecimento”; o segundo permite que sejam feitas questões à Base de Conhecimento e o Sistema Inteligente comporta-se como um especialista no assunto proposto.

⇒ Jogos: com suas regras precisas, porém virtualmente com complexidade ilimitada, são um completo e gerenciável microcosmo para testar os mecanismos essenciais da inteligência. Os esforços dos pesquisadores nesta área foram amplamente divulgados na imprensa, principalmente quanto aos jogos de xadrez, quando a vitória do computador “Deep Blue” sobre o campeão mundial Gary Kasparov foi manchete em vários jornais e revistas.

⇒ Redes Neurais: são redes de elementos altamente interconectados que podem mapear um padrão de dados de entrada complexo, com um complexo padrão de dados de saída. As redes neurais usam processamento numérico ao invés de simbólico. Cada elemento de processamento tem múltiplas entradas, gerando uma única saída, que pode ser alimentada a qualquer outro elemento da rede. O resultado é um conjunto altamente interconectado de elementos que é capaz de aprender.

⇒ Lógica Fuzzy: surgiu de um desejo de se quantificar os sistemas a base de regras. Tais sistemas são fixados na representação qualitativa do conhecimento, e a lógica fuzzy permite misturar uma abordagem quantitativa à representação qualitativa. Ela é usada para quantificar certos qualificadores, como *aproximadamente, geralmente, raramente, muitas, poucas, etc.*

Neste projeto, a área de Sistemas Inteligentes será mais utilizada, pois o objetivo é construir um ambiente que direcione o usuário para a opção mais conveniente de operação de um reator para um particular sistema.

2.4.2. Sistemas Inteligentes

Sistemas inteligentes são uma das aplicações da IA que mais cresce nos campos da ciência e engenharia, concentrando-se em atingir a performance de peritos humanos em um dado campo do conhecimento. Para tal, estes sistemas baseiam-se no “conhecimento avançado”. Quanto melhor o conhecimento, melhor a performance do sistema.

O conhecimento é geralmente incorporado no sistema inteligente através de relações, ou matemáticas, ou na forma “if-else”. Idealmente, estes sistemas poderiam construir sua própria base de conhecimento, embora este objetivo ainda seja bastante ambicioso. Outro ideal é permitir que peritos em certas áreas possam expandir a base de conhecimento sem no entanto entenderem de programação.

A base de conhecimento, formada por fatos, regras e heurísticas, contém informações profundas e específicas sobre o problema em questão, que na maioria das vezes é inserida no sistema por engenheiros especialistas. Certos sistemas são programados para que o próprio computador armazene algumas informações relevantes, ampliando a sua base de conhecimento por si só. A habilidade de realizar estas tarefas fazem destes sistemas “máquinas pensantes”^[15].

2.4.3. Aplicações de IA em Engenharia

Métodos e sistemas diagnósticos têm significância prática e forte tradição na literatura de engenharia de processos. Há um grande número de metodologias aplicando diferentes técnicas de IA para diagnóstico baseado em modelos: falhas, faltas, detecção e identificação de riscos. A maioria dos métodos disponíveis aplicam modelos de processo fixos e completos para apoiar o diagnóstico.^[17]

Leone^[18] desenvolveu um sistema baseado em conhecimento para estudos de HAZOP (HAZard and OPerability study, com o objetivo de identificar e avaliar riscos de segurança e problemas operacionais), criando uma estrutura de representação do conhecimento para englobar diferentes tipos de assuntos utilizados neste estudo.

Problemas de risco e operabilidade surgem da topologia detalhada da planta, características do sistema e projeto detalhado, e requer capacidade de modelar o sistema e descrever o comportamento do processo. Sistemas Inteligentes não são efetivos nestes termos, o que explica o interesse em aplicar o raciocínio qualitativo para análises de segurança. A abordagem é diferente daquela baseada em sistemas inteligentes, que requerem uma base de conhecimento e mecanismo de inferência para o raciocínio. O raciocínio qualitativo preocupa-se em desenvolver uma metodologia de simulação que pode lidar com modelos incompletos, funções com dados incompletos e também fornecer explicações diretas e casuais para o comportamento do sistema. Wang, Yang, Yang e McGreavy^[19] apresentaram um método para simulação qualitativa de comportamento, para tratar de aspectos de segurança e operabilidade de

plantas de processo, usando a abordagem fuzzy para ligar as simulações puramente qualitativas e quantitativas.

Bugaeva et al^[20] desenvolveram um sistema de simulação inteligente para sistemas de esgotos e processos de purificação de gases, combinando métodos de modelagem tradicionais (baseados em leis físico-químicas e processamento de dados experimentais) com técnicas de inteligência artificial, o que permite ganhar tempo de análise e melhorar sua qualidade.

2.4.4. O que são redes neurais artificiais?

Trata-se de um modelo baseado nos estudos biológicos de como o cérebro humano funciona. Matematicamente falando, é um algoritmo que permite prever valores de saída, tendo fornecido à rede vários valores de entrada.

A princípio tende-se a comparar uma rede neural à análise de regressão ou ajuste de dados, no entanto elas são muito mais poderosas uma vez que:

- a) Permitem o ajuste simultâneo de mais de uma variável de saída;
- b) Lidam com facilidade com múltiplos dados de entrada (comparado à dificuldade das regressões multivariáveis);
- c) Não necessitam de um modelo de regressão;
- d) Utilizam menos parâmetros que uma regressão polinomial;
- e) Têm grande tolerância a falhas de hardware e ruído nos dados de entrada;
- f) Não requerem o conhecimento dos fatores que queremos correlacionar. Todos os dados são apresentados à rede e ela decide quais são relevantes e quais não são.

Como a rede neural aprende ?

Como nas regressões estatísticas, apresenta-se à rede vários grupos [dados de entrada, dados de saída] e ela é treinada até que capte a essência do conjunto de dados. Matematicamente, a rede aprenderá, ajustando seus vários parâmetros internos até que o erro entre os dados de saída e os dados calculados seja minimizado.

2.4.5. Histórico das redes neurais

As redes neurais originaram-se como um modelo de como o cérebro funciona. Deste modo, suas raízes encontram-se na psicologia do pensamento, baseada nas teorias de Freud, William James e outros psicólogos do século XIX.

McCulloch e Pitts formularam o primeiro modelo de rede neural, concebendo um neurônio digital, porém sem capacidade para “aprender”. O trabalho de um outro psicólogo, Donald Hebb, introduziu a idéia do ‘aprendizado hebbiano’, enunciando que as mudanças na força das ligações sinápticas (ligações entre neurônios) são proporcionais à ativação dos neurônios. Esta foi a base formal para a criação das redes neurais com capacidade para aprender.

A teoria do aprendizado hebbiano descreveu uma regra para atualizar a força das ligações sinápticas em uma rede de duas camadas de neurônios, possibilitando tais camadas a aprender.

Frank Rosemblatt incorporou esta idéia de aprendizado em uma rede de duas camadas, chamando o sistema resultante de “perceptron”. Rosemblatt formulou uma regra de aprendizado baseado em pesos ajustados em proporção ao erro entre os neurônios de saída e os resultados desejados. O então chamado ‘teorema de convergência dos perceptrons’ provou que este procedimento resulta em um conjunto ótimo de pesos. Rosemblatt também formulou um perceptron de três camadas e tentou incorporar o aprendizado nele. Entretanto, ele não foi capaz

de encontrar um método prático para treinar os pesos entre os neurônios da camada de entrada e os neurônios da camada intermediária (esta, normalmente chamada de 'camada oculta').

Muitos problemas ainda não podiam ser resolvidos com redes de duas camadas. A falta de procedimentos matemáticos rigorosos que permitissem o aprendizado em redes multicamadas foi o maior obstáculo ao desenvolvimento das soluções com redes neurais. Em 1969, Minsky e Papert mencionaram este problema em *Perceptrons*. Minsky apontou corretamente as limitações dos perceptrons para muitos problemas e reconheceu a possibilidade de que redes multicamadas poderiam ultrapassar estas limitações. Mas ele não encontrou uma forma de tornar estas máquinas capazes de aprender, e então acreditou-se que as redes multicamadas seriam um 'beco sem saída'.

Desde a metade da década de 60, Stephen Grossberg desenvolveu modelos matemáticos para o funcionamento do cérebro. Pesquisas biológicas e psicológicas, entretanto, têm resultado em inúmeros modelos úteis e únicos de redes neurais, caracterizados pela habilidade de treinamento "on-line", capacidade de auto-organização e habilidade de formar representações compactas para fenômenos complexos.

Apesar de todo este importante trabalho com os sistemas com duas camadas, a descoberta independente da retropropagação por Werbos em 1974 e Parker em 1982 foi o próximo grande passo no avanço das redes neurais após o perceptron de Rosenblatt. A retropropagação permite o treinamento de redes multicamada. Assim, o obstáculo original contra o seu desenvolvimento - o treinamento - foi ultrapassado.

Rumelhart, Hinton e Williams exploraram a retropropagação em 1986 em seu trabalho de simulação de processos cognitivos. Seu trabalho foi muito difundido no mundo científico pelo *Processamento Paralelamente Distribuído* de McClelland e Rumelhart. Desde então, a retropropagação tem sido explorada em inúmeros campos, não tendo relação com o estudo ou simulação de processos cognitivos. Ela é uma ferramenta poderosa e útil para solucionar problemas que poderiam ser muito difíceis com o uso de técnicas computacionais convencionais.

Estes problemas vão desde o processamento de imagens até o reconhecimento sonoro, ou otimização.

Outros modelos têm sido desenvolvidos desde então para oferecer vantagens sobre a retropropagação original quando aplicados a problemas específicos.

O progresso na adoção das redes neurais como uma ferramenta de resolução de problemas nos últimos anos é realmente incrível. Disciplinas que há 5 anos nunca tinham ouvido falar de redes neurais agora as reconhecem como a melhor ferramenta. Entretanto, os maiores avanços ainda estão por vir, uma vez que as capacidades únicas das redes neurais tornam possível a solução de problemas cada vez mais difíceis.^[16]

3. TEORIA - REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

Para compreender melhor o funcionamento dos neurônios virtuais, é interessante estudar a fisiologia dos neurônios.

3.1. OS NEURÔNIOS ORGÂNICOS

Durante a evolução dos animais, surgiram dois sistemas de integração para coordenar as funções dos vários órgãos especializados. São eles, os sistemas nervoso e endócrino. O tecido nervoso acha-se espalhado pelo organismo, interligando-se e formando uma rede de comunicação que constitui o sistema nervoso.

O tecido nervoso é constituído por dois componentes principais: os neurônios e as células da Glia. Duas propriedades das células em geral, a excitabilidade e a condutividade, estão altamente desenvolvidas nos neurônios. A excitabilidade consiste na capacidade de reagir a estímulos físicos e químicos e a condutividade, na capacidade de transmitir um impulso elétrico.

As funções fundamentais do tecido nervoso são transformar em impulsos nervosos os estímulos do meio ambiente, coordenar e articular o funcionamento dos órgãos e sistemas e servir de substrato físico para a experiência consciente do indivíduo.

As células nervosas ou neurônios (figura 2) são formadas por um corpo celular (chamado de soma) que contém o núcleo, e do qual partem os prolongamentos, **dendritos** e **axônios**. Os dendritos são prolongamentos em geral numerosos, especializados em receber os estímulos do meio ambiente, de células sensoriais ou de outros neurônios. Os axônios, ou fibras nervosas, são prolongamentos únicos, especializados na condução do estímulo nervoso. A porção final do axônio é chamada de telodendro, onde o impulso nervoso é transmitido a outras células nervosas ou a células efectoras, como células musculares ou glandulares.

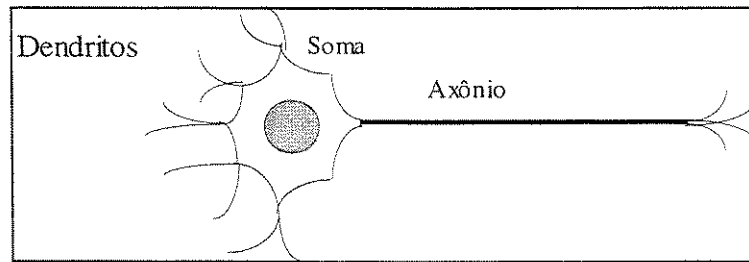


Figura 2: O neurônio orgânico

Quando um estímulo é recebido pelos dendritos de um neurônio, ocorrem fenômenos moleculares intracelulares, em conjunto denominados transdução de sinal, que acabam por depolarizar a membrana da célula nervosa neste ponto. Vários dendritos de um mesmo neurônio podem receber estímulos simultâneos, de modo que a soma de todas as despolarizações gera um campo elétrico que é sentido pela região-gatilho (a porção do axônio mais próxima do corpo celular do neurônio). É nesta região que estão localizados os elementos moleculares geradores do impulso nervoso, o qual consiste numa onda de despolarização que percorre a membrana do axônio ao longo de toda a sua extensão, até as terminações axônicas do telodendro.

Tal impulso nervoso refletirá todas as informações recebidas por todos os dendritos pertencentes ao neurônio que o gerou, não significando entretanto, que todas essas informações sejam simplesmente somadas na composição da resposta elétrica do neurônio.

Quando o impulso nervoso chega a uma das terminações axônicas, ocorre uma cadeia de eventos que culminam na transmissão desta informação elétrica gerada no neurônio pré-sináptico para a célula pós-sináptica. A região de contato entre estas duas células é conhecida como **sinapse**. A informação elétrica gerada por um neurônio pode chegar a várias células pós-sinápticas, pois o axônio, via de regra, se ramifica em várias terminações axônicas, cada uma atingindo um alvo diferente.

O efeito que um estímulo produz em um dendrito em particular é único e depende de vários fatores, como o estado prévio de excitação do neurônio ao qual este dendrito pertence, do número de informações recebidas por este ao longo do tempo, de moléculas controladoras presentes no meio e liberadas por células adjacentes, e do estado de facilitação deste dendrito

(este estado correlaciona-se com a frequência de estímulos recebidos por ele e com a frequência de impulsos gerados pelo neurônio ao qual ele pertence; este fenômeno está envolvido com os processos biológicos de aquisição de memória). Desta forma, uma mesma informação elétrica gerada por um neurônio pré-sináptico será recebida de forma diferente e única por cada neurônio pós-sináptico ao qual aquele se conecta.^[28]

3.2. OS NEURÔNIOS VIRTUAIS

Agora, com base nas pesquisas em torno dos neurônios reais, será apresentado o neurônio virtual.

O centro do neurônio deverá fazer as vezes de corpo celular, com as seguintes funções:

1. Receber as informações enviadas pelos dendritos;
2. Somar estas informações;
3. Produzir uma única informação que não será necessariamente igual à soma citada, mas sim uma função desta (função de ativação);

O neurônio deverá possuir dendritos que receberão de modo particular as informações enviadas pelos neurônios antecessores (pré-sinápticos). Como se pode verificar nos estudos biológicos, uma informação enviada por um certo neurônio antecessor é reconhecida diferentemente pelos vários neurônios aos quais ele está conectado. Uma forma de simular este comportamento é multiplicar o sinal recebido em cada dendrito por um certo “peso” que irá modificá-lo. Assim, uma certa informação enviada por um neurônio pré-sináptico **A**, será multiplicada por um peso w_1 nos dendritos do neurônio pós-sináptico **B**, e será multiplicada por um peso w_2 ($\neq w_1$) nos dendritos do neurônio pós-sináptico **C** (figura 3).

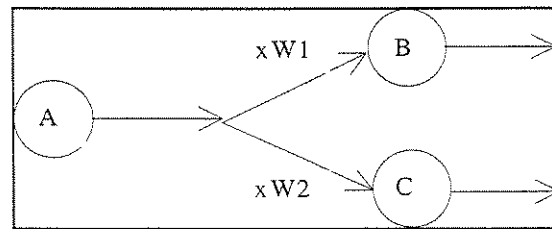


Figura 3: Cada neurônio percebe de modo particular um mesmo sinal

Por fim, a única informação gerada pelo neurônio deverá ser transmitida para os neurônios seguintes por meio das terminações do axônio. Na figura 4, pode-se observar o modelo resultante dessa construção: o neurônio virtual.

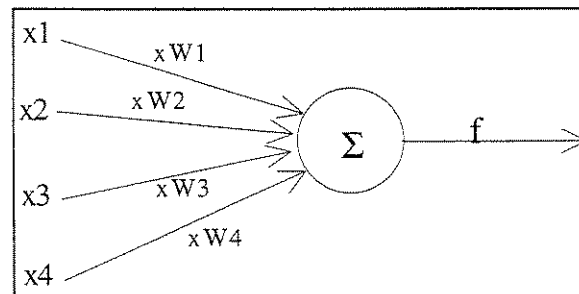


Figura 4: O neurônio virtual

Definido o neurônio virtual, pode-se construir agora o sistema nervoso virtual, comumente denominado **rede neural**. Para tal deve-se dispor de:

1. **Neurônios receptores**, que coletarão as informações do meio ambiente (x_1 e x_2), transformando-as em impulsos nervosos que serão transmitidos aos neurônios seguintes da rede. Cada neurônio de entrada receberá um determinado tipo de estímulo. O conjunto dos neurônios receptores constitui a **camada de entrada** da rede neural;
2. **Neurônios de saída**, que receberão as informações dos neurônios de entrada, gerando respostas aos estímulos recebidos, como os neurônios motores. Podem existir mais de um neurônio de saída, gerando múltiplas respostas aos dados de entrada, sendo que cada um deles recebe informações de todos os neurônios da camada de entrada. O conjunto dos neurônios de saída constitui a **camada de saída**.

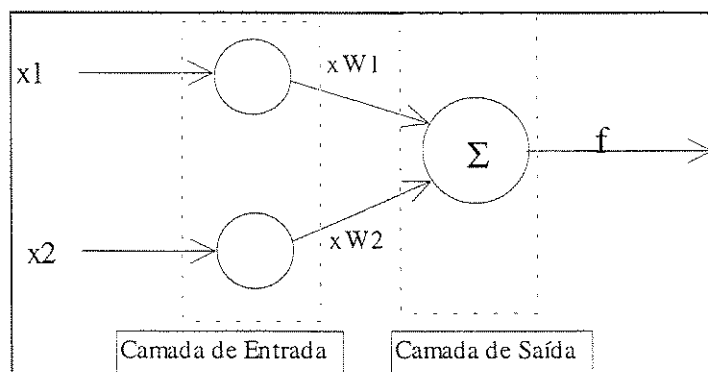


Figura 5: O perceptron

A figura 5 mostra um exemplo da rede neural mais simples, denominada **perceptron**, contendo apenas as camadas de entrada e saída. Este modelo simples de um neurônio artificial ignora muitas das características de um neurônio biológico. Por exemplo, ele não leva em consideração os atrasos de tempo que afetam a dinâmica do sistema; “inputs” geram “outputs” imediatamente. Mais importante, ele não inclui os efeitos de sincronismo e modulação de frequência presentes no mundo biológico, características estas consideradas cruciais por alguns pesquisadores.

Para tornar a rede neural mais eficiente, pode-se aumentar sua complexidade introduzindo uma ou mais camadas intermediárias de neurônios, denominadas **camadas ocultas**, sendo que cada uma destas funciona da mesma forma como descrita no caso simplificado. Cada neurônio de cada camada oculta se comporta de forma semelhante ao apresentado até agora: ele multiplica os sinais de todos os neurônios da camada anterior por um peso específico, soma os resultados, aplica uma função não linear sobre esta soma e produz um sinal que é enviado a todos os neurônios da camada seguinte. A figura 6 mostra um exemplo de uma rede neural com uma camada oculta. Atualmente, tais redes mais complexas são também chamadas de **perceptrons**.

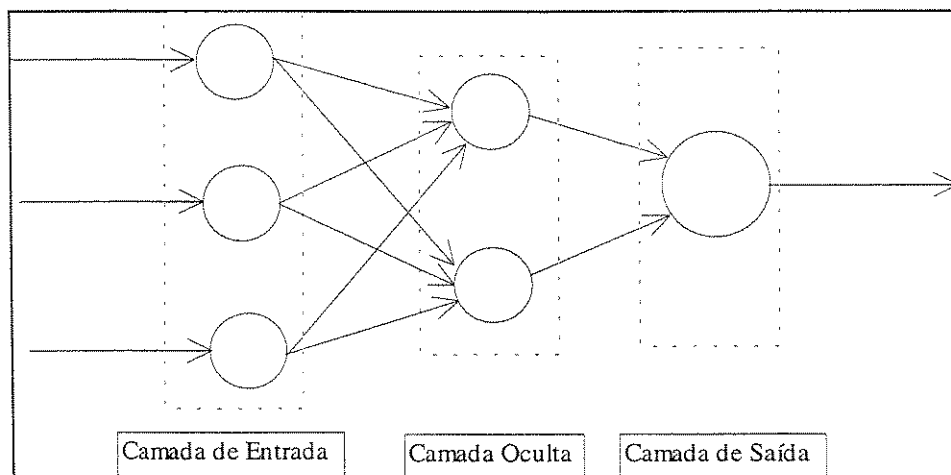


Figura 6: Rede neural

A literatura é inconsistente ao definir o número de camadas da rede. Alguns autores não contam a camada de entrada por esta não efetuar uma soma, mas somente transmitir os dados de entrada para a camada seguinte. Neste trabalho, para não gerar confusão, não se levará em conta esta problemática e o número total de camadas será contado, ou seja, a rede ilustrada na figura 6 será constituída de três camadas.

3.2.1. Número de neurônios em cada camada.

A camada de entrada e a camada de saída devem possuir o mesmo número de neurônios que o de variáveis de entrada e o de variáveis de saída, respectivamente. O número de neurônios na camada oculta deve ser da mesma ordem do número de neurônios das camadas de entrada e saída. Poucos neurônios na camada oculta retardam o processo de treinamento e muitos podem ocasionalmente degradar a capacidade de generalização da rede, tornando-a particular ao conjunto de dados apresentado.^[16, 21, 22]

3.3. IMPLEMENTAÇÃO

3.3.1. Calculando os dados de saída

A primeira etapa consiste em produzir um conjunto de “outputs” da rede neural, a partir de um conjunto de variáveis de entrada. Inicialmente, não se deve pensar em um conjunto de dados “input/output”, mas em apenas uma “linha da tabela”, um “ponto experimental”, ou seja, “n” variáveis independentes gerando “m” variáveis dependentes.

Assim, tem-se que calcular o sinal de saída de cada neurônio, começando pela camada de entrada, chegando até a camada de saída. Lembre-se de que na camada de entrada não há soma e nem pesos associados, uma vez que cada neurônio de entrada recebe apenas uma das variáveis independentes.

Sendo:

x_j^k : sinal enviado pelo neurônio “j” da camada “k”.

w_{ij}^k : peso que multiplica o sinal enviado pelo neurônio “i” da camada “k-1” para o neurônio “j” da camada “k”.

Então, o sinal de saída do neurônio “j” da camada “k” será:

$$x_j^k = f(S_j^k) \quad (1)$$

onde S_j^k é o somatório ponderado dos “inputs” recebidos pelo neurônio:

$$S_j^k = \sum_i (w_{ij}^k \times x_i^{k-1}) \quad (2)$$

e “f” é uma função não-linear, a priori, qualquer função diferenciável. Esta função é chamada de “função de ativação”, ou “função logística” ou simplesmente “sigmóide”, uma vez que este tipo de função é a mais desejada por ter uma derivada simples.

A função de ativação mais utilizada é (vide também gráfico 1):

$$f(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} \quad (3)$$

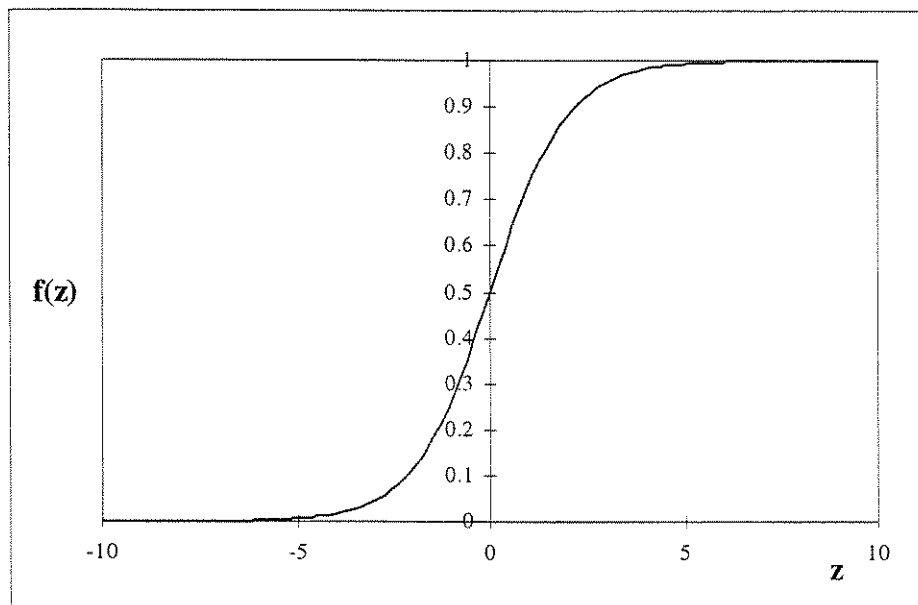


Gráfico 1: Função de ativação mais comumente usada em redes neurais.

Uma alternativa é a tangente hiperbólica: $f(z) = \tanh(z)$.

Pode-se representar o procedimento descrito na forma matricial:

$$X^k = f(X^{k-1} \cdot W^k) \quad (4)$$

onde W^k é uma matriz contendo todos os elementos w_{ij}^k e X^k é um vetor contendo todos os elementos x_j^k .

Aqui é possível visualizar a necessidade do emprego da função de ativação. Imagine uma rede com uma camada oculta, sem função de ativação. Calcular o sinal dos neurônios de saída consiste em multiplicar o vetor contendo os dados de entrada (X) pela matriz dos pesos da

camada oculta (W_1) e então multiplicar o vetor resultante pela matriz dos pesos da camada de saída (W_2); matematicamente:

$$X_{saída} = (X \cdot W_1) \cdot W_2$$

o que é idêntico a :

$$X_{saída} = X \cdot (W_1 \cdot W_2) = X \cdot W$$

ou seja, uma rede tri-camada sem função de ativação acaba por transformar-se numa rede bi-camada (com apenas uma camada de soma). Assim, demonstrou-se que as funções de ativação são vitais para a expansão das redes neurais além da primeira camada.

3.3.2. Treinando a rede neural

Neste ponto o leitor deve estar se perguntando como determinar o conjunto ideal de pesos nas várias camadas de modo a produzir os “outputs” desejados. A resposta é: a rede deve ser treinada, ou ensinada.

Da mesma forma que a memória humana é constituída pelo fortalecimento de certas sinapses, a rede neural será ensinada (ou treinada) modificando-se os pesos de modo a chegar em uma situação desejada. Talvez esta propriedade de “aprendizado” das redes neurais seja uma das suas mais interessantes e curiosas propriedades. No entanto, a euforia deve ser temperada com cautela, pois o aprendizado das redes é limitado e muitos problemas ainda encontram-se insolúveis.

Uma rede é treinada de modo que a aplicação de um conjunto de dados de entrada produza um conjunto de “outputs” que se aproximem aos dados de saída desejados (targets), ajustando os pesos das camadas convenientemente.

Os algoritmos de treinamento dividem-se em *supervisionados* e *não-supervisionados*.

O *treinamento supervisionado* requer um par [vetor de entrada, vetor dados de saída desejados] (novamente estamos falando de apenas uma linha de nossa tabela de dados), de modo que se possa **comparar** o resultado fornecido pela rede com os valores desejados. Geralmente, a rede é treinada sobre um grande número destes pares (ou seja, utilizando todos os dados disponíveis, ou todas as linhas de nossa tabela). O erro entre o vetor de “outputs” da rede e o vetor de “outputs” desejados determina as alterações a serem feitas nos pesos, como será descrito mais adiante.

O *treinamento não-supervisionado* é mais consistente com o aprendizado humano, uma vez que é inconsistente falar de um conjunto desejado de “outputs”. Aqui, o conjunto de treinamento consiste em apenas vetores de entrada e o algoritmo modifica os pesos para produzir vetores de saída que sejam consistentes, isto é, tanto a aplicação de um dos vetores de treinamento quanto a aplicação de um vetor suficientemente similar a ele irão produzir o mesmo padrão de “outputs”. No entanto, não há como determinar antes do treinamento qual padrão de saída será produzido por uma dada classe de vetores de entrada.^[16, 21, 22]

Neste texto, apenas do treinamento supervisionado será tratado, mais utilizado nos trabalhos em Engenharia.

3.3.3. A retropropagação

Retropropagando o erro

O algoritmo mais utilizado para o treinamento supervisionado é a *retropropagação* do erro entre o vetor de saída e o vetor desejado, ajustando-se convenientemente os pesos de modo a minimizar tal erro.

Suponha que a rede possui um certo erro global **E** ao qual está associada uma função diferenciável em relação a todos os pesos da rede. O conhecimento da verdadeira função **E** não é

importante para entender o mecanismo da retropropagação. O parâmetro crítico que é retropropagado pelas camadas é definido por:

$$e_j^k = -\frac{\partial E}{\partial S_j^k} \quad (5)$$

Este parâmetro pode ser considerado uma medida do erro local do neurônio “j” da camada “k”.

Usando a regra da cadeia duas vezes, obtém-se uma relação entre o erro local em um dado neurônio da camada “k” e todos os erros locais da camada “k+1”:

$$e_j^k = f'(S_j^k) \cdot \sum_i (e_i^{k+1} \cdot w_{ji}^{k+1}) \quad (6)$$

Note que na expressão anterior, há uma camada acima da camada “k”, portanto, ela não pode ser usada para a camada de saída.

Como estamos considerando a sigmóide como função de ativação, então:

$$f'(z) = f(z) \cdot (1 - f(z)) \quad (7)$$

De (1) sabemos que $f(S_j^k) = x_j^k$, portanto:

$$e_j^k = x_j^k \cdot (1 - x_j^k) \cdot \sum_i (e_i^{k+1} \cdot w_{ji}^{k+1}) \quad (8)$$

Assim, sabemos como retropropagar o erro na camada de saída. Mas como calcular este erro?

O erro na camada de saída

Na discussão anterior, foi suposta a existência de uma certa função erro E , sem no entanto explicitá-la. Necessita-se agora do conhecimento desta função para definir os erros locais aos neurônios da camada de saída. Suponha que um vetor \mathbf{X} contendo as variáveis de entrada seja apresentado à camada de entrada, e ainda que um vetor com os dados de saída desejados \mathbf{D} seja especificado “pelo professor”. Se o vetor com os dados de saída produzidos pela rede com um certo conjunto de pesos internos é \mathbf{O} , então uma medida do erro entre os vetores produzidos e desejados é dada pela eq. 9 (novamente devemos lembrar que ainda não estamos tratando um “set” completo de dados, mas apenas “uma linha da tabela”):

$$E = \frac{1}{2} \cdot \sum_m \left((d_m - o_m)^2 \right) \quad (9)$$

onde “m” é o número de variáveis de saída da rede. De (5), o erro local $[e_j^{(o)}]$ em cada neurônio “j” da camada de saída é:

$$e_j^{(o)} = -\frac{\partial E}{\partial S_j^{(o)}} = -\frac{\partial E}{\partial o_j} \times \frac{\partial o_j}{\partial S_j^{(o)}} = (d_j - o_j) \cdot f'(S_j) \quad (10)$$

Com (7), pode-se rearranjar esta expressão, produzindo:

$$e_j^{(o)} = (d_j - o_j) \cdot o_j \cdot (1 - o_j) \quad (11)$$

Atualização dos pesos

A atualização dos pesos é realizada com a regra dos gradientes descendentes:

$$\Delta w_{ij}^k = -\beta \cdot \frac{\partial E}{\partial w_{ij}^k} = -\beta \cdot \frac{\partial E}{\partial S_j^k} \cdot \frac{\partial S_j^k}{\partial w_{ij}^k} = + \beta \cdot e_j^k \cdot x_i^{k-1} \quad (12)$$

$$w_{ij}^k(\text{novo}) = w_{ij}^k(\text{velho}) + \Delta w_{ij}^k$$

onde β é conhecido como *coeficiente de aprendizado* (tipicamente 0,01 a 1,0).

Atualização cumulativa dos pesos.

Do modo como E foi definido, computa-se o erro global na rede apenas para um par particular $[X, D]$ (uma “linha da tabela”). Uma outra técnica que tem um efeito na velocidade de convergência é somente atualizar os pesos após todos os pares $[X, D]$ serem apresentados à rede (todas “as linhas de nossa tabela”), ao invés de fazê-lo após cada entrada.

Este procedimento é conhecido como *retropropagação cumulativa*, uma vez que os incrementos nos pesos são acumulados até que se complete a apresentação de todos os dados disponíveis. O número de pares [“input” / “output”] apresentados durante este acúmulo é conhecido como uma “época” e pode corresponder a um conjunto inteiro de dados ou a um subconjunto.

Um outro modo de compreender esta abordagem é em termos de uma função erro composta em contraste à função erro relativa a um dado individual. A função erro composta é definida como a soma das funções erro individuais; conseqüentemente sua derivada parcial com respeito a qualquer peso é a soma das correspondentes derivadas parciais das funções erro individuais. Uma vez que a variação nos pesos é proporcional às derivadas parciais, acumular a variação nos pesos sobre todo o conjunto de dados é equivalente a fazer a retropropagação usando a função erro composta.

Se a “época” não é muito grande, isto pode acelerar a convergência, uma vez que as atualizações individuais somente reduzem a função erro para um particular par, mas podem aumentar funções erro de outros componentes, ao passo que a atualização cumulativa sempre trabalhará em direção a reduzir a função erro global. Por outro lado, com a retropropagação

cumulativa, muito mais cálculos precisam ser feitos para realizar uma única atualização, e o benefício de se usar a função erro global poderá ser perdido se a “época” for grande.^[16, 21, 22]

Neste trabalho, a atualização dos pesos foi realizada após a apresentação de cada par [entrada, saída] e não pelo método cumulativo.

3.3.4. Algoritmo exemplificado passo-a-passo

Será utilizada uma rede neural tri-camada como a descrita na figura 6, contendo uma camada de entrada, uma camada oculta e uma camada de saída, para tratar os dados da tabela 1.

Tabela 1: Dados Experimentais

Y_3	Y_2	Y_1	Z
1	2	3	9
1	1	1	3
1	3	1	5

Como há três variáveis de entrada (Y_1 , Y_2 , Y_3) e apenas uma de saída (Z), a rede terá 3 neurônios na camada de entrada e 1 na camada de saída. Arbitrariamente, pode-se selecionar 2 neurônios para a camada oculta.

Para exemplificar o algoritmo, será utilizada a “primeira linha da tabela”.

Inicialmente, deve-se normalizar os dados a serem apresentados à rede. Os dados de entrada devem situar-se na faixa de 0 a 3 e como já se encontram neste intervalo, serão utilizados sem modificação. Os dados de saída devem situar-se na faixa de 0 a 1, portanto, os valores de Z da tabela 1 serão divididos por 10 antes de serem apresentados à rede.

Em seguida, deve-se estabelecer um conjunto de pesos aleatórios para iniciar o treinamento da rede. Chamar-se-á W a matriz de pesos associados à entrada dos neurônios da camada oculta, e ω o vetor com os pesos da camada de saída.

Os elementos de W serão do tipo W_{ij} (no sistema linha, coluna) onde “i” representará o neurônio da camada de entrada e “j” o neurônio da camada oculta. Deste modo, na coluna 2, estarão todos os pesos associados à entrada do neurônio 2 da camada oculta, e na linha 3, estarão todos os pesos associados ao sinal emitido pelo neurônio 3 da camada de entrada.

ω será um vetor pois há apenas um neurônio na camada de saída. O primeiro elemento será o peso multiplicado pelo sinal enviado pelo neurônio 1 da camada oculta.

Aleatoriamente:

$$W = \begin{bmatrix} 0,1 & 0,5 \\ 0,2 & 0,6 \\ 0,3 & 0,7 \end{bmatrix} \quad \omega = \begin{bmatrix} 0,8 \\ 1,2 \end{bmatrix}$$

Assim, as saídas dos neurônios da camada oculta serão (eq. 1 e eq. 3)

$$x_1 = f(0,1 \times 1 + 0,2 \times 2 + 0,3 \times 3) = f(1,4) = 0,80218$$

$$x_2 = f(0,5 \times 1 + 0,6 \times 2 + 0,7 \times 3) = f(3,8) = 0,97812$$

E o “output” da camada de saída será (eq. 1 e eq. 3)

$$o_1 = f(0,8 \times 0,80218 + 1,2 \times 0,97812) = f(1,815) = 0,86002$$

O output desejado (já normalizado) seria (eq. 3):

$$d_1 = 0,9$$

E pela eq. (11) computa-se o erro da camada de saída:

$$e^{(o)}_1 = (0,9 - 0,86002) \times (1 - 0,86002) \times 0,86002 = 0,004812$$

Ajusta-se os pesos da camada de saída ($k = 2$ na eq 12, com $\beta = 0,5$, por exemplo):

$$\Delta\omega_1 = 0,5 \times 0,004812 \times 0,80218 = 0,00193$$

$$\Delta\omega_2 = 0,5 \times 0,004812 \times 0,97812 = 0,00235$$

uma vez que $e^2_1 = e^{(o)}_1$ e x^1_i é o sinal de saída de neurônio “i” da camada oculta.

Calcula-se os erros da camada oculta ($k = 1$) usando (eq. 8):

$$e^1_1 = 0,80218 \times (1 - 0,80218) \times e^2_1 \cdot \omega_1 = 0,000611$$

$$e^1_2 = 0,97812 \times (1 - 0,97812) \times e^2_1 \cdot \omega_2 = 0,000124$$

Ajusta-se os pesos da camada oculta ($k = 1$ na eq. 12):

$$\Delta W_{11} = 0,5 \times e^1_1 \times Y_1 = 0,0003054$$

$$\Delta W_{21} = 0,5 \times e^1_1 \times Y_2 = 0,0006109$$

$$\Delta W_{31} = 0,5 \times e^1_1 \times Y_3 = 0,0009163$$

$$\Delta W_{12} = 0,5 \times e^1_2 \times Y_1 = 0,0000618$$

$$\Delta W_{22} = 0,5 \times e^1_2 \times Y_2 = 0,0001236$$

$$\Delta W_{32} = 0,5 \times e^1_2 \times Y_3 = 0,0001854$$

Incrementando os pesos com os ‘deltas’, tem-se o novo conjunto de pesos:

$$W = \begin{bmatrix} 0,100305 & 0,500062 \\ 0,200611 & 0,600124 \\ 0,300916 & 0,700185 \end{bmatrix} \quad \omega = \begin{bmatrix} 0,801930 \\ 1,202354 \end{bmatrix}$$

e com este novo conjunto, repete-se os cálculos acima até que o erro $e^{(o)}_1$ seja menor que um certo limite estipulado.

3.3.5. Tópicos Extras

Auto-ajuste do coeficiente de aprendizado (β).

À medida que o treinamento se desenvolve, o erro na camada de saída diminui, reduzindo cada vez mais os incrementos nos pesos e tornando o processo mais lento.

Neste trabalho, foi testado um artifício para reduzir o tempo de treinamento, que consiste em aumentar o valor de β multiplicando-o por um fator determinado pelo usuário, cada vez que o erro em iterações consecutivas for inferior a um mínimo pré-estabelecido.

De fato, obteve-se um aumento na velocidade de convergência (gráfico 2), sem prejudicar a qualidade do treinamento. No entanto, o usuário deverá otimizar tanto o fator de multiplicação de β quanto o erro mínimo, para obter um conjunto ótimo de pesos.

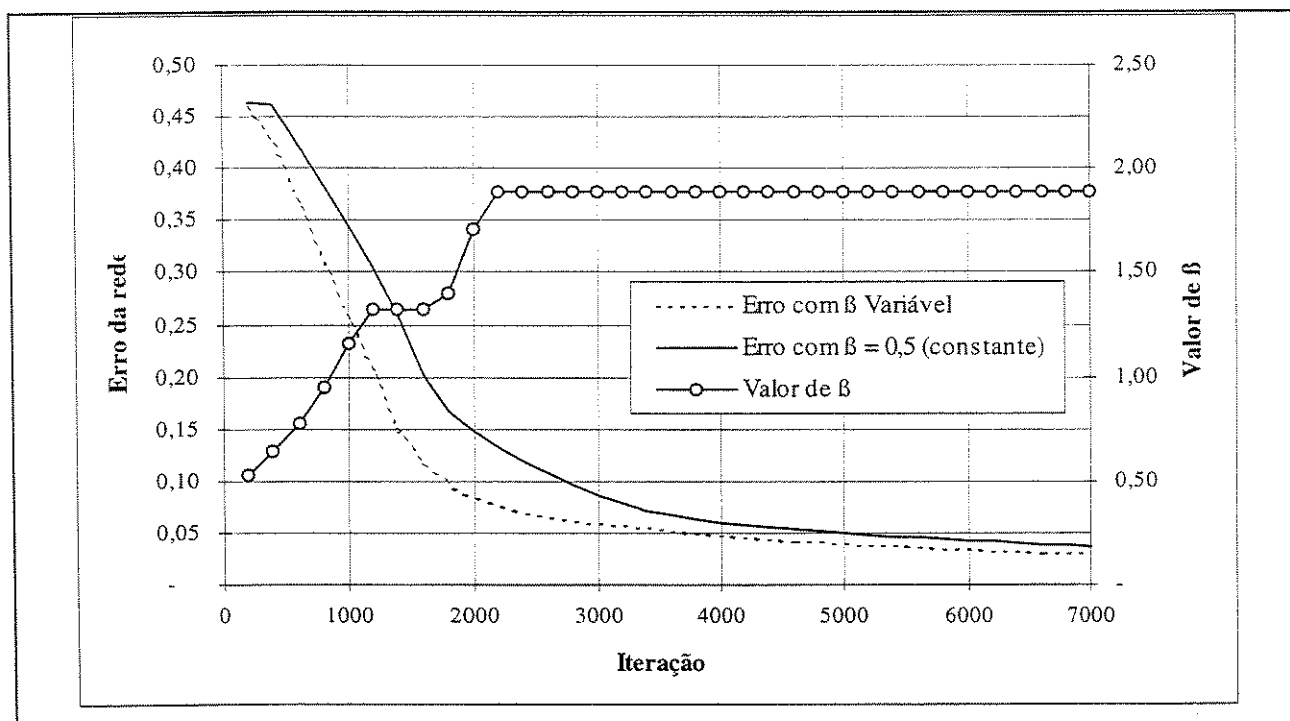


Gráfico 2: Auto ajuste de β vs. β constante.

No gráfico 2 encontra-se a evolução do erro global da rede neural em função do número de iterações no treinamento. A linha cheia representa o erro global quando o coeficiente de

aprendizado é mantido constante em 0,5. A linha pontilhada representa o erro global pelo método do auto-ajuste de β (a linha com bolas vazadas mostra o valor de β ao longo das iterações).

Note que para atingir o erro desejado de $3 \cdot 10^{-2}$ são necessárias 7.000 iterações pelo método de auto-ajuste e 9.000 iterações pelo método com β constante, portanto, o método proposto apresenta um aumento de 30% na velocidade de convergência.

Adicionando um Neurônio “Bias” (influenciador)

Em muitos casos é desejável acoplar um neurônio-extra a todos os neurônios da rede, também contando com um peso treinável para cada neurônio. Este procedimento permite convergência mais rápida do processo de treinamento.

Este implemento é facilmente incorporável ao algoritmo de treino; um peso conectado a “+1” é adicionado a cada neurônio. Este peso é treinável da mesma maneira que os demais exceto pelo fato de sua fonte ser sempre “+1”, ao invés de ser um dado de entrada ou um sinal de um neurônio da camada anterior.

Momento

Um método para melhorar o tempo de treinamento do algoritmo da retropropagação também melhorando a estabilidade do processo é chamado de *momento*. O método envolve a adição de um termo à equação de ajuste dos pesos que é proporcional ao ajuste anterior. Uma vez que um ajuste é feito, ele é “lembrado” e serve para modificar todos os ajustes subsequentes. A equação (12) modificada fica:

$$\Delta w_{ij}^k(\text{novo}) = -\beta \cdot e_j^k \cdot x_i^{k-1} + \alpha \cdot \Delta w_{ij}^k(\text{velho})$$

onde α é conhecido como *coeficiente de momento* e comumente situa-se em torno de 0,9.

Usando este método, a rede tende a seguir o fundo dos vales na superfície da função erro (se eles existem) , ao invés de cruzar rapidamente de um lado para outro. Ele parece funcionar bem para alguns problemas, mas tem efeito negativo (ou nenhum) em outros.

Outros algoritmos de treinamento

A retropropagação é o algoritmo de treinamento mais usado na resolução dos problemas de engenharia, no entanto, convém lembrar que outros algoritmos existem.

Um exemplo é a *contrapropagação*, cuja descrição pode ser encontrada em ^[21].

3.3.6. Advertências

Saturação da rede

Enquanto a rede treina, os pesos podem ajustar-se em valores muito altos, o que pode forçar todos ou a maioria dos neurônios a operar em altos valores de sinal de saída, numa região onde a derivada da função de ativação é muito pequena (vide gráfico 1). Uma vez que o erro retropropagado é proporcional à derivada citada, o processo de treinamento pode tornar-se extremamente lento. Ainda há pouco entendimento deste problema, comumente evitado reduzindo-se o coeficiente de treinamento.

Mínima local

A retropropagação emprega um tipo de gradiente descendente, ou seja, ele segue a inclinação da superfície da função erro, constantemente ajustando os pesos em direção a um mínimo. No entanto, a função erro de uma rede complexa é extremamente ondulada e a rede pode ficar presa em um mínimo local.

Alguns métodos que utilizam procedimentos estatísticos podem ser utilizados para encontrar o mínimo global, porém contando com maiores tempos de treinamento.^[16, 21, 22]

4. APRESENTAÇÃO DO SISTEMA DE SOFTWARES

As técnicas que serão apresentadas neste projeto (engenharia co-corrente, inteligência artificial e redes neurais) podem ser aplicadas de um modo geral a qualquer sistema ou equipamento, no entanto, para fins de implementação computacional, é necessário definir um certo processo onde as técnicas serão utilizadas, à medida que se faz obrigatório considerar as particularidades do sistema ou equipamento.

O processo escolhido como exemplo foi a oxidação do etanol a acetaldeído em fluxo de ar, sobre catalisador de Fe-Mo, utilizando um reator de leito fixo encamisado (fluido refrigerante é o vapor d'água), conforme descrito por Maciel Filho ^[3]. Além do reator, estarão envolvidos trocadores de calor e equipamentos de separação para a corrente efluente do reator, conforme mostra o diagrama representado na Figura 7.

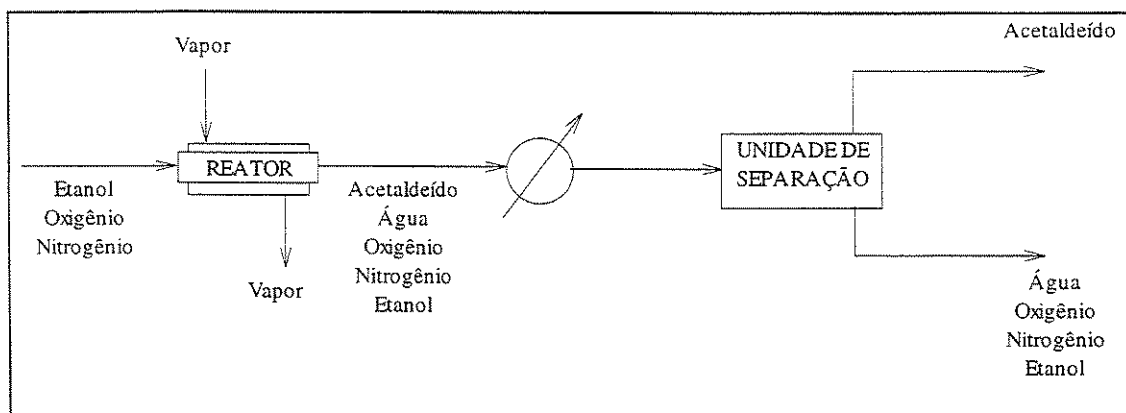


Figura 7: Fluxograma conceitual simplificado do sistema de produção de acetaldeído

A reação química estudada é representada pela equação:



cujo modelo cinético é dado pela seguinte expressão da taxa, levantada por Maciel Filho ^[3], desenvolvida através de um mecanismo reacional baseado no método de Temkin:

$$r = \frac{2 \cdot K_2 \cdot K_1 \cdot P_A \cdot P_B}{K_1 \cdot P_A + 2 \cdot K_2 \cdot P_B + K_1 \cdot K_3 \cdot P_C \cdot P_D + K_1 \cdot K_3 \cdot P_A \cdot P_C} \quad (14)$$

onde:

r é a taxa da reação em kmol/h.kg_{cat},

P_i é a pressão parcial (atm) do componente “i” dada por:

Etanol:
$$P_A = \frac{(1 - X_A) \cdot P}{\delta}$$

Oxigênio:
$$P_B = \frac{(0,21 \cdot R_M - 0,5 \cdot X_A) \cdot P}{\delta}$$

Acetaldeído:
$$P_C = \frac{X_A \cdot P}{\delta}$$

Nitrogênio
$$P_D = \frac{0,79 \cdot R_M \cdot P}{\delta}$$

com

X_A : conversão em termos do reagente limitante (etanol);

P : pressão total (atm);

R_M : razão molar ar/etanol;

$\delta = 1 + 0,5 \cdot X_A + R$;

Os valores dos parâmetros K_i 's são dados por:

$$K_1 = 3,41492 \cdot 10^6 \cdot \text{EXP}[-15746 / R.T]$$

$$K_2 = 2,34757 \cdot 10^8 \cdot \text{EXP}[-21793 / R.T]$$

$$K_3 = 1,19281 \cdot 10^{-4} \cdot \text{EXP}[9347 / R.T]$$

$$K_4 = 1,78585 \cdot 10^7 \cdot \text{EXP}[-13674 / R.T]$$

onde R = constante dos gases ideais;

T = temperatura (K).

Operando o reator com temperatura de alimentação inferior a 240 °C, a oxidação a acetaldeído é a única reação que ocorre no leito catalítico. Para temperaturas de alimentação superiores a 240 °C, iniciam-se as reações laterais de geração do formaldeído e combustão do etanol a gás carbônico. Tais reações laterais são muito exotérmicas e levam à perda da estabilidade do reator e desencadeamento de outras reações paralelas.

Propõe-se neste trabalho, a apresentação de um ambiente computacional para simular e analisar o processo escolhido, auxiliando a operação e projeto do reator de leito fixo. As ferramentas computacionais desenvolvidas para tornar possível tal tarefa são:

1. Software para treinamento de rede neural, compilado no Microsoft Fortran Workbench;
2. Software para simulação do reator de leito fixo para a oxidação do etanol (EtOH) a acetaldeído (Fortran), compilado no Microsoft Fortran Workbench;
3. Sistema Especialista encarregado de analisar os resultados da simulação do reator, que pode executar automaticamente o simulador do reator para obter mais informações. O programa fonte

foi compilado em Borland C++ para DOS (o compilador Borland C++ para Windows não reconhece a função para executar um programa externo);

4. Simulação do sistema de troca de calor e unidade de separação no Hysim (simulador comercial), havendo transferência de informações do simulador do reator para o Hysim através de um arquivo de dados.

O diagrama esquemático do sistema de softwares encontra-se representado na Figura 8, indicando o fluxo de informações entre eles e os arquivos de dados envolvidos. A linha pontilhada representa uma ação que é executada iterativamente, a partir de um comando do sistema especialista, quando este necessita de informações adicionais.

Inicialmente, o usuário deve preencher todos os arquivos de dados com as informações necessárias (parte destes arquivos só serão preenchidos uma única vez para um determinado sistema e outros serão modificados a cada simulação), em seguida, o simulador do reator é executado com o comando do usuário, realizando-se uma primeira simulação do sistema (duração em torno de 1 segundo - Pentium 350 MHz). No próximo passo, o usuário aciona o Sistema Especialista, que por sua vez executa automaticamente o simulador do reator diversas vezes de modo a obter os dados necessários para a análise do sistema (duração em torno de 1 minuto - Pentium 350 MHz). Terminado este procedimento, os resultados da simulação e da análise do Sistema Especialista encontram-se disponíveis em arquivos de dados tabulados para criação de tabelas ou gráficos.

A simulação da unidade de separação é realizada posteriormente, a partir do comando do usuário no Hysim. Os dados atualizados da simulação do reator são passados para o simulador comercial na forma de um arquivo de dados de transferência.

O treinamento da rede neural é realizado com o software em Fortran criado para esta função. O processo completo de treinamento, incluindo a otimização de todos os parâmetros da rede, é lento e consome bastante tempo (dias a meses, dependendo da complexidade do problema), no entanto, só necessita ser realizado uma vez para cada sistema químico (reação) estudado para determinar o

conjunto de pesos ideal para a rede. As sessões de treinamento realizadas neste projeto tiveram duração entre 15 e 120 minutos (Pentium 350 MHz), dependendo das configurações estudadas, dispendendo-se aproximadamente 2 meses para a determinação dos parâmetros ótimos. Definido o conjunto final de pesos, o cálculo da taxa de reação pela rede neural (realizado pela sub-rotina dentro do simulador do reator) é muito rápido (inferior a 1 centésimo de segundo - Pentium 350 MHz).

A interligação entre os softwares mostrada na Figura 8, com alta troca de informação entre eles é uma característica básica da área do conhecimento denominada “Engenharia Co-corrente”^[13].

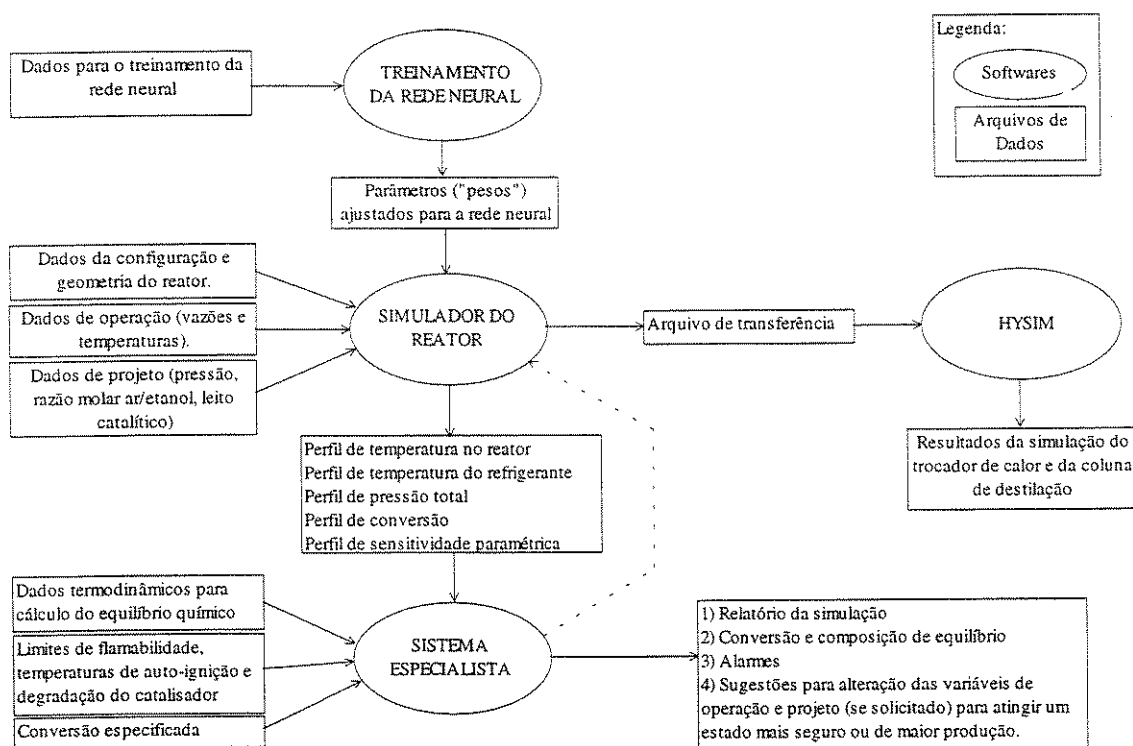


Figura 8: Diagrama de fluxo de informação no sistema de softwares.

5. SIMULAÇÃO DO REATOR

O software de simulação do reator (REDEREAT.FOR) foi desenvolvido em linguagem Fortran, baseado em um modelo matemático determinístico pseudo-homogêneo unidimensional, considerando as equações de balanço de massa, energia e quantidade de movimento.

Pela maneira como o reator é constituído, o sistema é essencialmente heterogêneo, pois as partículas de catalisador são sólidas e a mistura reagente está na fase gasosa ou líquida (ou ambas). Apesar da heterogeneidade do sistema, a representação pseudo-homogênea pode ser bastante adequada pela fácil e rápida solução que permite quando comparada com os modelos heterogêneos. Também contribuindo para a importância dos modelos pseudo-homogêneos, está a imprecisão associada com os parâmetros dos modelos heterogêneos, que para possibilitarem uma boa predição dos sistemas, necessitam de extensivos estudos paramétricos e definições adequadas dos parâmetros de transferência de calor e massa associados com a partícula de catalisador.^[4]

Quando reações exotérmicas são consideradas, a troca térmica entre o leito catalítico e o fluido refrigerante passa a ser de grande importância para o projeto e definição de política operacional adequada do reator. Para tanto, é importante escolher o diâmetro adequado dos tubos, além de outros detalhes de construção mecânica que envolve, inclusive, os possíveis arranjos e direções de escoamento do fluido refrigerante em relação ao fluxo dos reagentes.

Para análise do comportamento do reator catalítico de leito fixo, serão utilizadas as equações de balanço (15) a (18), baseadas nas seguintes hipóteses:

- a) a diferença de temperatura e concentração entre as partículas do catalisador e o fluido reagente é desprezível. Esta consideração é mais próxima da realidade quanto maiores forem as vazões utilizadas, o que normalmente ocorrem em reatores industriais;
- b) a dispersão axial mássica e térmica podem ser ignoradas, devido às dimensões axiais dos tubos, de acordo com os critérios propostos por Varma;^[23]

c) escoamento dos gases na forma empistonada, que é comum em muitos sistemas industriais, especialmente quando tubos de diâmetro reduzido são utilizados;

Balanco de Massa

$$\frac{dX_A}{dz} = \frac{M \cdot \rho_B \cdot r}{G} \quad (15)$$

Balanco de Energia

Reagentes:

$$\frac{dT}{dz} = \frac{(-\Delta H) \cdot \rho_B \cdot r}{G \cdot C_{pc}} - \frac{4 \cdot U \cdot (T - T_c)}{G \cdot C_{pg} \cdot d_t} \quad (16)$$

Fluido Refrigerante:

$$\frac{dT_c}{dz} = \frac{\pi \cdot d_t \cdot U \cdot (T - T_c)}{W_c \cdot C_{pc}} \quad (17)$$

Balanco de Quantidade de Movimento (Ergun):

$$\frac{dP}{dz} = -7,165 \cdot 10^{-13} \cdot \left(1,75 + \frac{150 \cdot (1 - \varepsilon)}{Re} \right) \cdot \frac{(1 - \varepsilon) \cdot G^2}{\varepsilon^3 \cdot \rho_g \cdot d_p} \quad (18)$$

onde:

- M: peso molecular médio da mistura reagente (kg/kmol);
- ρ_B : densidade aparente do leito ($\text{kg}_{\text{cat}}/\text{m}^3$);
- G: vazão mássica do gás reagente ($\text{kg}/\text{h} \cdot \text{m}^2$);
- z: posição axial (m);

- ΔH : entalpia de reação (kcal/kmol);
 T : temperatura do reator ($^{\circ}\text{C}$);
 T_c : temperatura do refrigerante ($^{\circ}\text{C}$);
 C_{pg} : capacidade calorífica do gás reagente (kcal/kg. $^{\circ}\text{C}$);
 C_{pc} : capacidade calorífica do refrigerante (kcal/kg. $^{\circ}\text{C}$);
 d_t : diâmetro interno do reator (m);
 W_c : vazão mássica de refrigerante (kg/h);
 Re : número de Reynolds;
 ε : porosidade do leito;
 ρ_g : densidade do gás (kg/m³);
 d_p : diâmetro da partícula de catalisador (m);
 P_A : pressão parcial do etanol (atm);
 U : coeficiente global de troca térmica (kcal/h.m². $^{\circ}\text{C}$), dado por:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_e} + \frac{d_e}{2 \cdot K_a} \cdot \ln\left(\frac{d_e}{d_t}\right) + \frac{1}{h}$$

- onde: d_e : diâmetro externo do tubo do reator (m);
 K_a : condutividade térmica do aço inox (kcal/h.m. $^{\circ}\text{C}$);
 h_e : coeficiente externo de troca térmica (constante = 2500 kcal/h.m². $^{\circ}\text{C}$);
 h : coeficiente interno de troca térmica (kcal/h.m². $^{\circ}\text{C}$), dado pela correlação de Leva:

$$h = 3,5 \cdot \frac{K_g}{d_t} \cdot \exp\left(-4,6 \cdot \frac{d_p}{d_t}\right) \cdot Re^{0,7}$$

- com K_g : condutividade térmica do ar (kcal/h.m. $^{\circ}\text{C}$);

Portanto, o valor de U varia ao longo do reator e é recalculado a cada passo de integração.

As condições de contorno utilizadas foram:

Em $z = 0$ (entrada do reator):

$$\Rightarrow X_A = 0;$$

$$\Rightarrow P = P_o;$$

$$\Rightarrow T = T_o;$$

$$\Rightarrow T_c = T_{c_o} \text{ (somente para operação co-corrente).}$$

Em $x = L \Rightarrow T_c = T_{c_L}$ (somente para operação contracorrente);

Na equação do balanço de energia para o fluido refrigerante, atenção deve ser dada ao sinal da vazão de refrigerante: negativo para fluxo contracorrente e positivo para fluxo co-corrente. No software de simulação, o sinal negativo do fluxo de refrigerante é colocado automaticamente, quando o computador é informado que o reator simulado é contra-corrente.

A resolução das equações diferenciais ordinárias foi realizada numericamente pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem. [24]

Os conceitos de sensibilidade paramétrica, conforme descritos por Rodrigues^[4] foram aplicados a este programa com o objetivo de quantificar a estabilidade térmica do reator. Há diversas formas de exprimir a sensibilidade paramétrica, sendo que a mais recomendada para este caso é a taxa de variação da temperatura do reator em função da variação da temperatura do fluido refrigerante (equação diferencial).

A expressão da sensibilidade paramétrica (S_2) é bastante complexa, e sua dedução é extensa. De uma forma genérica, pode-se representá-la como (a equação completa pode ser obtida em [4]):

$$\frac{dS_2}{dz} = f(T, P_A, T_C, \Delta H_R, G, d_i, U, d_p, Re, C_p, \rho_B)$$

A equação da sensibilidade paramétrica é resolvida juntamente com as equações de balanço, obtendo-se um perfil axial desta variável. O grau de estabilidade do reator é comumente quantificado pelo valor máximo da sensibilidade paramétrica no leito, localizado na região do ponto quente (hot spot).

A taxa da reação é calculada a cada passo de integração, através de um algoritmo de redes neurais. Os dados de entrada para a rede são a pressão, a temperatura e a conversão no passo anterior de integração. Os parâmetros (pesos) da rede neural devem ser ajustados para o sistema estudado (reação química) antes da primeira simulação. Tal procedimento de ajuste é denominado “treinamento” e só necessita ser realizado uma vez.

O software está programado para simular duas configurações de fluxo:

a) co-corrente (reagentes e o fluido refrigerante entram pelo mesmo lado do reator): neste caso, a temperatura de entrada do fluido refrigerante é fixada com o mesmo valor da temperatura de entrada dos reagentes, como é feito na prática, para melhor operacionalização do reator (evitar troca de calor desnecessária antes da ignição da reação);

b) contra-corrente (reagentes e fluido refrigerante entram por lados opostos): neste caso, a temperatura de saída do refrigerante é fixada com o mesmo valor da temperatura de entrada do reagente, pelo mesmo motivo descrito no item (a). A resolução das equações diferenciais é realizada de modo iterativo, utilizando o método da bissecção.^[24]

São dados de entrada do simulador (fornecidos através de arquivo de dados):

- ✓ Geometria do reator (comprimento, diâmetro interno e externo do tubo);
- ✓ Configuração (contra-corrente ou paralelo);
- ✓ Dados do catalisador (diâmetro de partícula, densidade aparente do leito);
- ✓ Vazão de fluido refrigerante;
- ✓ Relação molar ar/etanol à entrada do reator;
- ✓ Pressão à entrada do reator;
- ✓ Vazão de reagentes;
- ✓ Temperatura dos reagentes à entrada do reator;
- ✓ Passo de integração;
- ✓ Parâmetros para a rede neural.

São dados de saída do simulador:

- ✓ Perfil de temperatura no reator;
- ✓ Perfil de temperatura do refrigerante;
- ✓ Perfil de conversão;
- ✓ Perfil de pressão total;
- ✓ Perfil de sensibilidade paramétrica;
- ✓ Perfis de pressões parciais.

Os resultados da simulação são gravados em arquivos de dados, disponíveis ao sistema especialista e ao Hysim.

6. TREINAMENTO DA REDE NEURAL

A implementação da rede neural no simulador do reator com a finalidade de calcular a taxa da reação foi citada no item anterior. Antes de iniciar qualquer simulação utilizando a rede, é preciso treiná-la para que ela “aprenda” a relação entre a taxa de reação (variável de saída) e os parâmetros que a afetam (variáveis de entrada): temperatura, pressão e conversão.

Na realidade, a taxa da reação ainda é função da razão molar ar/etanol (uma medida da composição da mistura reagente), como mostra a equação da taxa (14), porém, decidiu-se manter este parâmetro constante neste treinamento pois:

- a) com quatro variáveis de entrada, a rede teria dificuldade no treinamento, sendo necessário trabalhar com um maior número de dados, aumentando o tempo computacional e afastando os resultados estimados dos previstos pelo modelo;
- b) para levantamento dos dados cinéticos, é comum pré-fixar a razão molar ar/etanol entre 16 e 20 para melhorar a troca térmica devido ao efeito convectivo do nitrogênio. Abaixo deste intervalo o reator torna-se instável e difícil de ser operado ^[3].

Neste projeto, os dados para o treinamento da rede neural foram levantados com o uso da equação da taxa determinada por Maciel Filho ^[3], no entanto, dados de processos reais (SDCD) poderiam ter sido utilizados diretamente.

6.1. PARÂMETROS INICIAIS

6.1.1. Variáveis de entrada e saída

Nesta etapa, já foram determinados o número de variáveis que serão estimadas pela rede neural (apenas a taxa de reação, como variável de saída) e quais as variáveis a afetam (temperatura, pressão e conversão, como variáveis de entrada, lembrando que a razão molar

ar/etanol será mantida constante). Assim, obrigatoriamente, a rede neural para o problema em questão terá 3 neurônios na camada de entrada e 1 neurônio na camada de saída.

O número de neurônios na camada oculta será estudado e deverá situar-se entre 1 e 10.

Conhecidas as variáveis que compõem o sistema, deve-se definir uma faixa para cada uma, na qual o treinamento será realizado. Estas faixas representam as condições onde a estimativa da taxa pela rede é válida (uma vez que não se recomenda realizar extrapolações com redes neurais) devendo englobar as situações do sistema a serem simuladas.

Conversão:	0 a 1,0
Temperatura:	464 a 679 K (190 a 406 °C)
Pressão:	1,77 a 2,20 atm

Para estas faixas, o valor da taxa de reação situaria-se entre 0 e 2,5 kmol/h.kg_cat.

A rede neural geralmente não produz bons resultados quando lida com números de diferentes ordens de grandeza, portanto, recomenda-se^[21] normalizar os valores de modo a situarem-se na faixa de 0 a 3.

Deste modo, os valores de conversão e pressão foram multiplicados pelo fator 1, os valores de temperatura divididos por 1000 e os valores de taxa de reação multiplicados por 1.

Faixas normalizadas:

Conversão:	0 a 1,0
Temperatura:	0,46 a 0,68 K
Pressão:	1,77 a 2,20 atm
Taxa de reação:	0 a 2,5 kmol/h.kg_cat.

6.1.2. Apresentação dos dados à rede

Duas abordagens distintas foram utilizadas para realizar o treinamento da rede com os dados levantados a partir da equação da taxa (14). Inicialmente, numa abordagem chamada de ***treinamento generalizado***, procurou-se utilizar dados de entrada de uma forma organizada de modo a cobrir um intervalo pré-determinado de cada variável independente, comparando-se o valor da taxa estimado pela rede com o valor calculado pelo modelo. Na abordagem definitiva, chamada de ***treinamento orientado***, foram utilizados conjuntos de dados particulares, comparando-se os perfis de temperatura, conversão, pressão e sensibilidade paramétrica gerados na simulação com o modelo e com a rede neural.

Em ambos os casos, utilizou-se apenas um conjunto de dados de treinamento para todo o reator, ou seja, determinou-se um único conjunto de pesos para estimar a taxa de reação em qualquer ponto do reator.

6.2. TREINAMENTO GENERALIZADO

O treinamento generalizado foi a primeira abordagem utilizada para o treinamento da rede. Neste caso, os dados de entrada foram escolhidos de forma ordenada, formando uma tabela com combinações de valores pré-estabelecidos de cada variável de entrada, calculando-se, para cada, a taxa da reação.

O objetivo desta abordagem foi cobrir homogeneamente todo o “range” de cada variável independente, procurando dar à rede um caráter generalista.

Um exemplo do conjunto de dados para o treinamento generalizado encontra-se na tabela 2.

Tabela 2: Amostra do conjunto de dados para treinamento generalizado.

Taxa	Conversão	Temperatura / 1000	Pressão
2.14E+00	0	0.5	2
4.38E-01	0.1	0.5	2
2.18E-01	0.2	0.5	2
1.32E-01	0.3	0.5	2
8.60E-02	0.4	0.5	2
5.77E-02	0.5	0.5	2
3.85E-02	0.6	0.5	2
2.47E-02	0.7	0.5	2
1.44E-02	0.8	0.5	2
6.35E-03	0.9	0.5	2
0.00E+00	1	0.5	2
2.69E-01	0	0.45	2
1.32E-02	0.1	0.45	2
5.95E-03	0.2	0.45	2
3.47E-03	0.3	0.45	2
2.22E-03	0.4	0.45	2
1.47E-03	0.5	0.45	2
9.72E-04	0.6	0.45	2
6.20E-04	0.7	0.45	2
3.58E-04	0.8	0.45	2
3.09E-01	0	0.45	2.3
1.32E-02	0.1	0.45	2.3
5.97E-03	0.2	0.45	2.3
3.48E-03	0.3	0.45	2.3
2.22E-03	0.4	0.45	2.3
1.47E-03	0.5	0.45	2.3
9.73E-04	0.6	0.45	2.3
6.20E-04	0.7	0.45	2.3
3.58E-04	0.8	0.45	2.3
1.58E-04	0.9	0.45	2.3
0.00E+00	1	0.45	2.3
7.57E-01	0	0.47	2.3
6.14E-02	0.1	0.47	2.3
2.83E-02	0.2	0.47	2.3
1.66E-02	0.3	0.47	2.3
1.07E-02	0.4	0.47	2.3
7.09E-03	0.5	0.47	2.3
4.69E-03	0.6	0.47	2.3
3.00E-03	0.7	0.47	2.3
1.73E-03	0.8	0.47	2.3
7.64E-04	0.9	0.47	2.3
0.00E+00	1	0.47	2.3

Os parâmetros da rede (mostrados na tabela 3) foram otimizados após várias sessões de treinamento, buscando-se minimizar o erro relativo médio entre a taxa da reação calculada pelo modelo (r_{modelo} , segundo a eq 14) e a estimativa da rede (r_{rede}), de acordo com a equação:

$$\bar{E}_R = \frac{\sum |r_{\text{REDE}} - r_{\text{MODELO}}|}{N} \quad (19)$$

onde N é o número de dados apresentados à rede.

O erro composto desejado foi calculado através da equação seguinte, computando-se o erro da rede para todo o conjunto de dados apresentado.

$$E_{\text{composto}} = \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^N [(d_i - p_i)^2]$$

onde d_i é um dado de saída apresentado à rede (desejado) e p_i é o valor correspondente predito pela rede neural.

Tabela 3: Parâmetros da rede neural otimizados pelo treinamento generalizado.

Parâmetro	Valor otimizado	Faixa de Estudo
Número de neurônios na camada oculta	3	2 a 5
Número de pares [input;output]	320	176 a 640
Diferença percentual mínima em erros consecutivos para alteração de β ^(a)	0,001	0,1 a 0,0001
Alteração de β ($\beta = \beta \times \text{valor}$) ^(a)	1,001	1,0001 a 1,1
Erro composto desejado	$3,3 \cdot 10^{-3}$	
Erro relativo médio	27 %	variável-alvo
Erro composto / número de dados	$1,03 \cdot 10^{-5}$	
Número de iterações para treinamento	660.000	

(a) Vide item 3.3.5, sobre o “Auto-ajuste do coeficiente de aprendizado”.

Após a realização do treinamento generalizado, o conjunto de “pesos” (parâmetros de ajuste da rede neural) resultante foi utilizado para executar o software de simulação do reator. No entanto, com nenhum conjunto de “pesos” determinado por este treinamento a simulação pôde ser

completada devido a problemas de “overflow” e “floating point error”, provocados por um disparo na taxa de reação quando o reator foi simulado a temperaturas de entrada dos gases superiores a 190 °C. Assim, por uma limitação do método de treinamento da rede (e não limitação no simulador), não foi possível realizar a simulação.

6.3. TREINAMENTO ORIENTADO

O conjunto de dados para o treinamento nada mais é que uma determinada seqüência de combinações de taxa de reação \Leftrightarrow conversão \Leftrightarrow temperatura \Leftrightarrow pressão, a uma determinada composição de reagentes (razão molar ar/etanol). Mas, será que as combinações utilizadas no treinamento generalizado são compatíveis com aquelas que realmente ocorrem no reator?

É claro que muitas das combinações utilizadas no treinamento eram completamente diferentes daquelas que ocorrem no reator simulado, colaborando para a generalização do treinamento, mas não para a adequação da simulação à realidade. Assim, partiu-se para uma nova abordagem de treinamento (o treinamento orientado), fornecendo dados para o treinamento com combinações conhecidas pelo reator simulado.

Tais dados (combinações) foram fornecidas diretamente pelo simulador do reator, gravando-se em um arquivo de dados os perfis de temperatura no reator, pressão, conversão e taxa de reação lado a lado. Nas diferentes simulações, os dados de entrada para o simulador (temperatura de entrada e vazões) foram alterados, produzindo vários conjuntos de dados. Estes conjuntos foram então misturados de modo a compor um único “set” para treinamento que contemplasse diferentes situações operacionais.

O novo conjunto composto para treinamento continha combinações ditadas pelo próprio reator, garantindo maior precisão na simulação (neste caso **possibilitando** a simulação), no entanto, perdendo capacidade de generalização, ou seja, aplicável a uma menor faixa das variáveis operacionais e de projeto.

O próximo passo foi otimizar o processo de treinamento para obter melhor resultado na simulação.

Um exemplo do conjunto de dados para o treinamento orientado encontra-se na tabela 4.

Tabela 4: Amostra do conjunto de dados para treinamento orientado.

Taxa	Conversão	Temperatura / 1000	Pressão
1.61E-01	1.58E-01	4.97E-01	1.999051
1.61E-01	1.58E-01	4.97E-01	1.999051
1.67E-01	1.72E-01	4.98E-01	1.99899
1.68E-01	1.73E-01	4.98E-01	1.99899
1.74E-01	1.87E-01	5.00E-01	1.998928
1.74E-01	1.87E-01	5.00E-01	1.998928
1.81E-01	2.02E-01	5.02E-01	1.998867
1.81E-01	2.02E-01	5.02E-01	1.998867
8.45E-01	8.73E-01	6.20E-01	1.998673
4.25E-01	9.45E-01	6.27E-01	1.998594
5.89E-01	9.09E-01	6.19E-01	1.998593
1.94E-01	9.74E-01	6.25E-01	1.998515
2.73E-01	9.61E-01	6.21E-01	1.998514
1.04E-01	9.84E-01	6.18E-01	1.998434
1.84E-01	9.69E-01	6.15E-01	1.998435
4.54E-02	9.92E-01	6.12E-01	1.998357
7.61E-02	9.86E-01	6.11E-01	1.998356
3.53E-02	9.92E-01	6.05E-01	1.998279
5.11E-02	9.89E-01	6.04E-01	1.99828
2.13E-02	9.95E-01	5.98E-01	1.998203
2.53E-02	9.94E-01	5.98E-01	1.998203
1.42E-02	9.96E-01	5.92E-01	1.998127
1.75E-02	9.95E-01	5.92E-01	1.998128
9.82E-03	9.97E-01	5.86E-01	1.998053

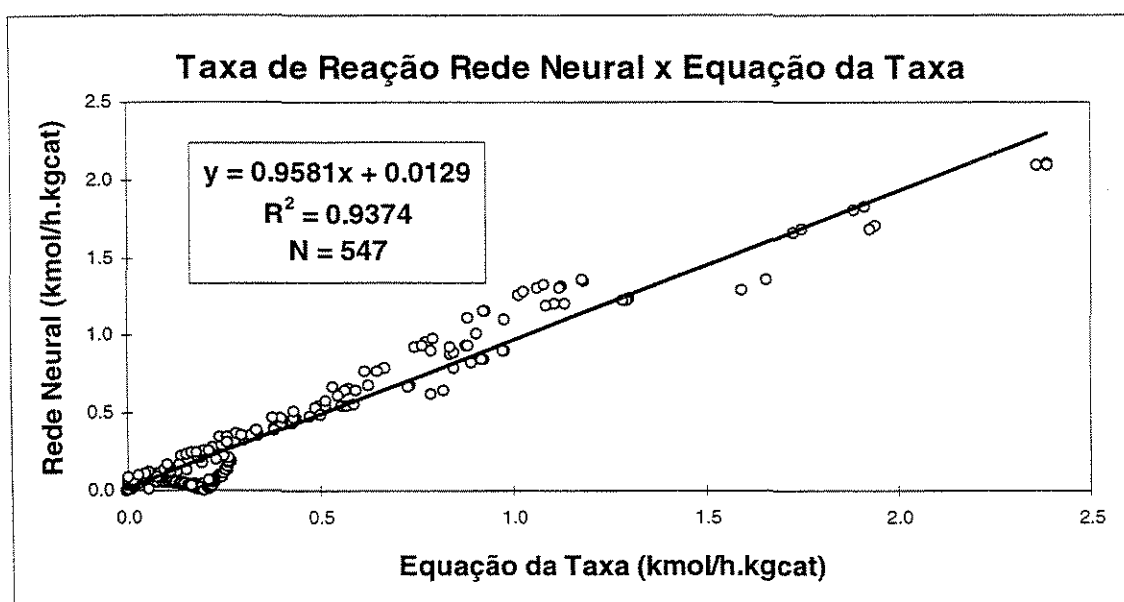
Os demais parâmetros de entrada foram otimizados, buscando-se não mais minimizar o erro relativo médio, mas sim realizar a simulação adequada do reator utilizando a rede neural. Diversas sessões de treinamento foram realizadas, comparando-se os perfis obtidos com a rede neural com aqueles obtidos com o modelo, estudando-se todos os parâmetros até chegar aos valores otimizados mostrados na tabela 5.

Tabela 5: Parâmetros da rede neural otimizados pelo treinamento orientado.

Parâmetro	Valor otimizado	Faixa de Estudo
Número de neurônios na camada de entrada	3	obrigatório
Número de neurônios na camada de saída	1	obrigatório
Número de neurônios na camada oculta	3	2 a 5
Número de pares [input;output]	547	500 a 1000
Diferença percentual mínima em erros consecutivos para alteração de β (fator de aprendizado) ^(a)	0,001	0,1 a 0,0001
Alteração de β ($\beta = \beta \times \text{valor}$) ^(a)	1,001	1,0001 a 1,0
Erro composto	$3,0 \cdot 10^{-2}$	
Erro composto / número de dados	$5,5 \cdot 10^{-5}$	
Número de iterações para treinamento	7.100	

(a) Vide item 3.3.5, sobre o “Auto-ajuste do coeficiente de aprendizado”.

O gráfico 3 mostra os valores da taxa de reação estimados pela rede neural plotados contra os valores da taxa calculados pelo modelo (dados de treinamento). Pelo coeficiente de correlação calculado (0,94) e pela proximidade dos pontos à reta $x = y$ (coeficiente angular próximo a 1 e coeficiente linear próximo a zero) verifica-se que o treinamento da rede foi adequado.

**Gráfico 3:** Taxa da reação estimada pela rede vs. taxa calculada pelo modelo.

Com estes parâmetros otimizados, obteve-se um conjunto de “pesos” para a rede neural que pôde ser usado para simulação adequada do reator. Os perfis gerados na simulação com a rede neural foram muito próximos aos perfis obtidos na simulação com a equação da taxa, como será mostrado na discussão dos resultados.

Comparando-se as tabelas 3 e 5, verifica-se que no treinamento orientado o erro composto otimizado dividido pelo número de dados é 5 vezes maior que o valor encontrado no treinamento generalizado. A princípio, isto soa estranho pois o melhor esquema de treinamento foi aquele que apresentou maior erro médio, no entanto, é importante lembrar que se uma rede for super-treinada^[29] (“over trained”), pode-se prejudicar a capacidade de predição da rede. Ou seja, se a rede neural for treinada através da abordagem orientada, buscando um menor valor do erro da rede, haverá uma perda de precisão quando a rede for utilizada para prever a taxa de reação durante a simulação do reator.

7. SISTEMA ESPECIALISTA

A estrutura básica do sistema especialista consiste de um software em C++^[25] com a função de analisar a simulação do reator e eventualmente executar automaticamente novas simulações para obtenção de informações adicionais. O programa foi construído na forma de módulos (sub-rotinas), cada um com uma função particular:

1. Equilíbrio Químico;
2. Estudo das Variáveis de Operação;
3. Alarme de Temperatura Alta, Conversão Baixa e Alta Queda de Pressão;
4. Estudo de Risco de Explosão;
5. Estudo de Variáveis de Projeto;
6. Cálculo da condição de não degradação do catalisador.

7.1. EQUILÍBRIO QUÍMICO

Muitas vezes os reatores são extensivamente simulados no intuito de se obter altas conversões sem no entanto atentar à máxima conversão possível dada pela termodinâmica^[26]. Esta sub-rotina calcula a conversão de equilíbrio para qualquer reação química a ser estudada, comparando-a com a conversão simulada e com a conversão especificada (fornecida pelo usuário). A intenção é analisar quão longe o reator simulado está do equilíbrio, e se a especificação para conversão mínima é termodinamicamente possível.

Calculada a conversão de equilíbrio, determina-se qual a composição da corrente efluente do reator na condição de equilíbrio.

A sub-rotina utiliza os seguintes dados para a realização dos cálculos:

a) Fonte: arquivos de saída do simulador do reator.

- Temperatura média no reator (T_M , em K);
- Vazão molar dos componentes da alimentação do reator (n_i^0 , em mol/h);
- Conversão do reator simulado (X_{SIM}).

b) Fonte: arquivo de dados fornecido pelo usuário.

- Conversão especificada para o reator (X_{OP});
- Número de substâncias envolvidas (N);
- Nome das substâncias envolvidas (incluindo inertes);
- Coeficiente estequiométrico das substâncias envolvidas (ν_i);
- Entalpia molar de formação a 25°C (ΔH_f , em kcal/mol);
- Energia livre de Gibbs molar de formação a 25°C (ΔG_f , em kcal/mol);
- Parâmetros **a** (a_i), **b** (b_i), **c** (c_i) e **d** (d_i) para cálculo da capacidade calorífica (C_{p_i}) pela expressão ^[26]:

$$C_{p_i} = a_i + b_i \cdot T + c_i \cdot T^2 + d_i \cdot T^3 \quad (20)$$

- Intervalo de temperatura onde os parâmetros a, b, c, d são válidos.

Para o sistema estudado, os dados da tabela 6 foram levantados ^[26]:

Tabela 6: Dados fornecidos pelo usuário para o sistema especialista.

<i>Substância</i>	<i>Etanol</i>	<i>Oxigênio</i>	<i>Acetaldeído</i>	<i>Água</i>
Coef. Esteq.	-1	-0,5	+1	+1
ΔH_f a 25 °C	-52,23	0	-39,72	-57,7979
ΔG_f a 25°C	-40,23	0	-31,46	-54,6351
a	4,75	6,085	4,14	7,7
b	5,006E-2	0,3631E-2	3,164E-2	0,04594E-2
c	-2,479E-5	-0,1709E-5	-0,515E-5	0,2521E-5
d	4,79E-9	0,3133E-9	-3,8E-9	-0,8587E-9
Limites de validade de a, b, c, d (K)	273,0 - 1500,0	273,0 - 1800,0	273,0 - 1000,0	273,01 - 800,0

Inicialmente, a rotina realiza o cálculo da entalpia, energia livre de Gibbs de reação, Δa , Δb , Δc , Δd pelas equações (21):

$$\begin{aligned}\Delta H_R(25^\circ \text{C}) &= \sum_{i=1}^N \Delta H_{F,i}(25^\circ \text{C}) \cdot v_i \quad ; \quad \Delta G_R(25^\circ \text{C}) = \sum_{i=1}^N \Delta G_{F,i}(25^\circ \text{C}) \cdot v_i \\ \Delta a &= \sum_{i=1}^N a_i \cdot v_i \quad ; \quad \Delta b = \sum_{i=1}^N b_i \cdot v_i \quad ; \quad \Delta c = \sum_{i=1}^N c_i \cdot v_i \quad ; \quad \Delta d = \sum_{i=1}^N d_i \cdot v_i\end{aligned}\quad (21)$$

Em seguida calcula-se a constante de equilíbrio a 25°C :

$$K_a(25^\circ \text{C}) = \exp\left(\frac{-\Delta G_R(25^\circ \text{C})}{R \cdot T_{\text{REF}}}\right) \quad (22)$$

onde $T_{\text{REF}} = 25^\circ \text{C}$ ou $298,15 \text{ K}$
 R : constante dos gases ideais;

e converte-se o resultado para a temperatura média no reator (T_M) segundo a equação^[26]:

$$\begin{aligned}\ln\left(\frac{K_a(T_M)}{K_a(T_{\text{REF}})}\right) &= \frac{\Delta a}{R} \cdot \ln\left(\frac{T_M}{T_{\text{REF}}}\right) + \frac{\Delta b}{2 \cdot R} (T_M - T_{\text{REF}}) + \frac{\Delta c}{6 \cdot R} (T_M^2 - T_{\text{REF}}^2) + \frac{\Delta d}{12 \cdot R} (T_M^3 - T_{\text{REF}}^3) + \\ &+ \frac{1}{R} \cdot \left[-\Delta H_R(25^\circ \text{C}) + \Delta a \cdot T_{\text{REF}} + \frac{\Delta b}{2} \cdot T_{\text{REF}}^2 + \frac{\Delta c}{3} \cdot T_{\text{REF}}^3 + \frac{\Delta d}{4} \cdot T_{\text{REF}}^4 \right] \cdot \left[\frac{1}{T_M} - \frac{1}{T_{\text{REF}}} \right]\end{aligned}$$

Por outro lado, sabe-se que:

$$K_a(T) = \prod_{i=1}^N a_i^{v_i} \quad (23)$$

Supondo que os componentes dentro do reator comportem-se como uma mistura de gases ideais (o que é razoável à medida que o reator é operado a baixas pressões, isto é, abaixo de 5 atm ^[26]), tem-se:

$$K_a(T) = \prod_{i=1}^N \left(\frac{y_i \cdot P}{1 \text{ atm}} \right)^{v_i} \quad ; \quad y_i = \frac{n_i}{n_{\text{TOT}}} \quad (24)$$

onde: P : pressão no reator (atm).
 n_i : número de moles do componente "i" no equilíbrio (mol).
 n_{TOT} : número total de moles no equilíbrio (somatório de n_i).

e

$$n_i = n_i^0 - (v_i / v_1) \cdot n_1^0 \cdot X_{eq} \quad (25)$$

sendo: componente $i = 1$: reagente limitante;

X_{eq} : conversão de equilíbrio em relação ao reagente limitante.

Portanto, uma vez que $K_a(T)$ já foi calculado, a única variável a ser determinada é X_{eq} , o que pode ser feito encontrando-se a raiz da equação:

$$K_a(T) - \prod_{i=1}^N (y_i \cdot P)^{v_i} = 0 \quad (26)$$

através do método numérico da bissecção [24].

Com a conversão de equilíbrio, calcula-se:

- composição de equilíbrio nas condições do reator;
- produção de equilíbrio de acetaldeído;

7.2. ESTUDO DAS VARIÁVEIS DE OPERAÇÃO

Este módulo realiza um estudo das variáveis de operação:

⇒ **temperatura de entrada dos reagentes (T_o);**

⇒ **vazão de reagentes (Q);**

⇒ **vazão de refrigerante (w).**

Como dito, a temperatura de entrada do refrigerante está amarrada à temperatura de entrada dos reagentes. A pressão será considerada aqui como uma variável de projeto e a razão molar ar/etanol será mantida fixa em 25 por razões já comentadas.

O usuário fornece um intervalo das variáveis de operação onde deseja realizar um estudo, e o número de simulações para cada intervalo. Tal estudo é realizado alterando-se uma variável por vez, mantendo as duas outras com os valores da simulação principal (antes de executar o sistema especialista, é obrigatório inicialmente executar o simulador do reator em separado, sendo esta execução chamada de *simulação principal*).

Para cada combinação do estudo, uma simulação é realizada, arquivando-se:

- ⇒ variáveis de operação (T_o , Q e w);
- ⇒ temperatura máxima no reator;
- ⇒ temperatura média no reator;
- ⇒ conversão final;
- ⇒ queda de pressão no leito;
- ⇒ sensibilidade paramétrica máxima.

7.3. ALARMES

Esta sub-rotina é responsável pela verificação de situações extremas do reator. Os dados necessários para os cálculos são fornecidos pelo usuário como:

- √ Conversão mínima desejada;
- √ Temperatura de degradação do catalisador;
- √ Quais substâncias são inflamáveis;
- √ Temperatura de auto-ignição das substâncias;
- √ Limites de flamabilidade;
- √ Queda de pressão máxima permitida;

Os alarmes emitidos são:

7.3.1. Alarme de degradação do catalisador

É emitido quando a temperatura em algum ponto do reator ultrapassa a temperatura de degradação do catalisador. O sistema especialista imediatamente verifica nos arquivos gerados pela sub-rotina *Estudo das Variáveis de Operação* quais as condições necessárias para evitar a degradação do catalisador e sugere novas simulações.

7.3.2. Alarme de risco de explosão

É emitido quando a temperatura em algum ponto do reator ultrapassa 95% da temperatura de auto-ignição de alguma das substâncias presentes no reator. Imediatamente, o sistema especialista chama a sub-rotina *Estudo de Risco de Explosão*.

7.3.3. Alarme de alta queda de pressão

É emitido quando a queda de pressão no reator ultrapassa o valor máximo estipulado.

7.2.4. Alarme de baixa conversão

É emitido quando a conversão final é menor que a conversão mínima especificada. O sistema especialista imediatamente verifica nos arquivos gerados pela sub-rotina *Estudo das Variáveis de Operação* quais as condições necessárias para levar a conversão acima da desejada e sugere novas simulações.

7.4. ESTUDO DE RISCO DE EXPLOSÃO

Caso a temperatura de auto-ignição de alguma substância presente no reator seja ultrapassada, esta sub-rotina verifica se a concentração da substância em questão encontra-se dentro dos limites de flamabilidade. Se sim, há o risco de explosão e o sistema especialista informa quais pontos do reator estão sob risco.

O limite de flamabilidade é dado em termos de relação molar da substância inflamável em ar (ou seja, em base de oxigênio e nitrogênio inerte). No nosso sistema, há outras substâncias além do ar e, desta forma é possível que a concentração da substância inflamável esteja dentro do limite de flamabilidade e não haja oxigênio suficiente para a combustão. Para contornar este inconveniente, na verificação do risco de explosão, dois cálculos são realizados: primeiro verifica-se se a concentração da substância encontra-se dentro dos limites de flamabilidade, e em seguida verifica-se se a razão molar substância/oxigênio também encontra-se dentro dos limites de flamabilidade escritos como razão substância/oxigênio. Se as duas condições são satisfeitas e a temperatura de auto-ignição foi ultrapassada, há o risco de explosão no reator.

7.5. ESTUDO DE VARIÁVEIS DE PROJETO

Este módulo executa um estudo das variáveis de projeto, semelhante ao estudo das variáveis de operação. As variáveis de projeto são:

- ⇒ **diâmetro do reator (d_i);**
- ⇒ **diâmetro equivalente da partícula de catalisador (d_p);**
- ⇒ **pressão total (P).**

A razão molar ar/etanol será mantida fixa em 25.

O usuário fornece um intervalo das variáveis de projeto onde deseja realizar o estudo, e o número de simulações para cada intervalo. Tal estudo é realizado alterando-se uma variável por vez, mantendo as duas outras com os valores da simulação principal.

No estudo do diâmetro do reator, o diâmetro interno é variado, mantendo-se a espessura do tubo calculada na simulação principal.

Para cada combinação do estudo, uma simulação é realizada, arquivando-se:

- | | |
|--|------------------------------------|
| ⇒ as variáveis de projeto (d_i , d_p e P); | ⇒ conversão final; |
| ⇒ temperatura máxima no reator; | ⇒ queda de pressão no leito; |
| ⇒ temperatura média no reator; | ⇒ sensibilidade paramétrica máxima |

O módulo também fornece o comprimento mínimo do reator necessário para atingir a conversão desejada. Os perfis de pressão parcial de todos os componentes são determinados para que o usuário possa visualizar a região do reator onde as maiores transformações ocorrem.

7.6. CÁLCULO DA CONDIÇÃO DE NÃO DEGRADAÇÃO DO CATALISADOR

Nas simulações realizadas com este sistema, verificou-se que para obter conversão satisfatória no reator (acima de 0,98) as condições operacionais necessárias levam a um ponto quente no reator superior à temperatura de degradação do catalisador. Na prática, em situações como esta, o que ocorre é a degradação do catalisador somente na região do ponto quente, sendo necessárias manutenções periódicas do leito ou redução da eficiência do reator.

Esta sub-rotina determina qual a condição operacional (T_o , Q e w) necessária para operar o reator abaixo da temperatura de degradação do catalisador, informando neste caso, a temperatura máxima, a temperatura média, a conversão final, a queda de pressão e a sensibilidade paramétrica máxima.

No caso estudado, a temperatura de degradação foi fornecida ao Sistema Especialista 10% mais alta que o valor real (256 °C), para compensar a imprecisão dos valores de temperatura na região do ponto quente, onde as diferenças entre o modelo e a rede neural são maiores (valores previstos pela rede mais altos).

8. UNIDADE DE SEPARAÇÃO

Após o reator, o sistema estudado conta com uma unidade de separação para recuperação do acetaldeído, produto de reação, como mostra a figura 7. Para determinar a melhor configuração da unidade de separação, foi empregado o software comercial Hysim, utilizando os dados fornecidos pelo simulador do reator.

Inicialmente, optou-se pelo sistema de separação clássico para este caso^[8], contendo um trocador de calor após o reator, seguido de uma ou duas colunas de destilação. Esta configuração clássica foi simulada no Hysim, sob as condições estudadas neste trabalho (alta razão molar ar/etanol na alimentação do reator), e concluiu-se que para separar o acetaldeído da corrente gasosa, é necessário trabalhar com temperaturas de $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$ no topo da coluna, devido à grande quantidade de oxigênio e nitrogênio na saída do reator, que torna difícil a remoção do produto principal presente em menor quantidade.

Outras configurações foram testadas, obtendo-se uma opção mais acessível para recuperar o acetaldeído nas condições deste trabalho. A nova configuração é mais complexa, contando com uma coluna de absorção, no entanto, possui condições térmicas na separação mais amenas.

A melhor configuração, mostrada na figura 9, consta de um trocador de calor após o reator, resfriando a corrente e enviando-a para a coluna de absorção. Nesta coluna, o acetaldeído e a água (tanto na fase líquida como vapor) são extraídos da corrente gasosa, utilizando o etanol resfriado como solvente. A corrente líquida enriquecida passa por um novo trocador de calor e é desviada para uma coluna de destilação, onde obtém-se o acetaldeído com alto grau de pureza, restando a mistura de etanol, água e um pouco de acetaldeído como produto de fundo.

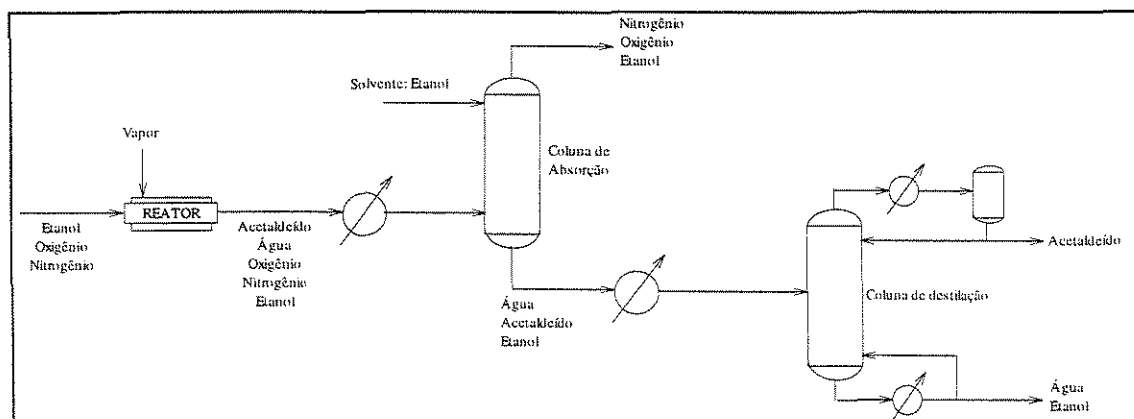


Figura 9: Configuração da unidade de separação do acetaldeído

Esta configuração da unidade de separação foi implementada no Hysim, podendo ser simulada utilizando as informações da corrente de saída do reator, geradas pelo simulador REDEREAT.FOR, gravadas em um arquivo de transferência.

9. RESULTADOS E DISCUSSÃO

9.1. SIMULAÇÃO PRINCIPAL DO REATOR

Antes de iniciar a execução do sistema especialista, é necessário definir um estado de operação atual, e realizar uma primeira simulação nesta condição, chamada de *simulação principal*.

Para ilustrar o funcionamento do sistema, o estado inicial do reator será definido pelos valores da tabela 7:

Tabela 7: Dados de entrada para a simulação principal.

Dados de projeto	Valor	Unidade
Comprimento do reator	2,0	m
Temperatura do refrigerante	210	°C
Diâmetro interno do reator	25,00	mm
Diâmetro externo do reator	31,75	mm
Diâmetro da partícula de catalisador	2,0	mm
Razão molar ar/etanol	25	
Pressão à entrada	2,0	atm
Dados de operação		
Vazão de reagentes	4.000	kg/h.m ²
Vazão de refrigerante	30	kg/h
Temperatura dos reagentes	210	°C

Com estes dados, o reator foi simulado utilizando-se o software com a rede neural desenvolvido neste trabalho (REDEREAT.FOR). Para efeito de comparação repetiu-se a simulação com o software convencional contendo a equação da taxa para o cálculo da taxa de reação (REATOR.FOR).

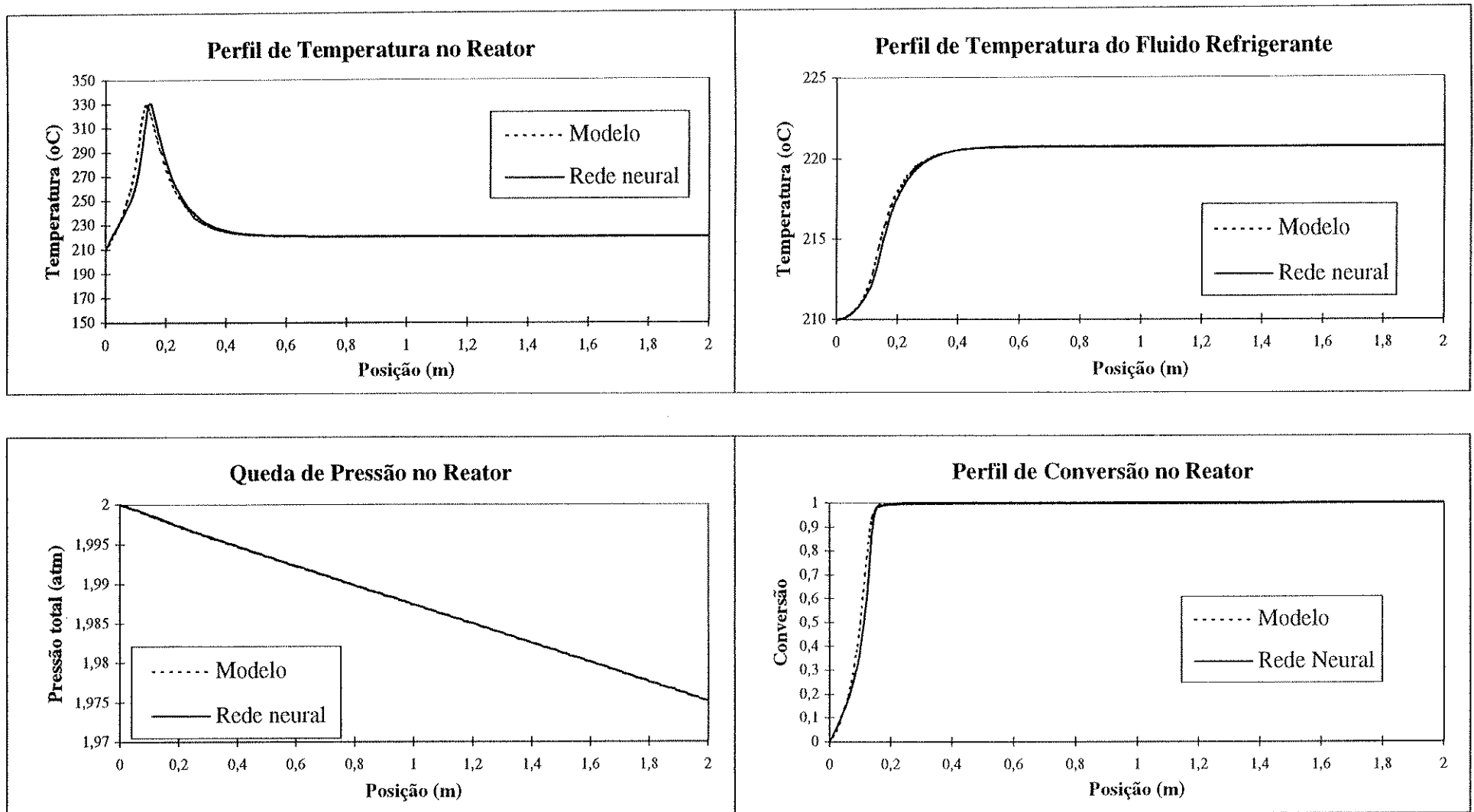
As figuras 10, 11 e 12 mostram os perfis de temperatura, pressão, conversão e sensibilidade paramétrica gerados pelos dois simuladores, a partir dos dados de entrada descritos na tabela 7. Como mencionado, a razão molar ar/etanol será mantida obrigatoriamente fixa com o

mesmo valor utilizado para o levantamento de dados do treinamento orientado, ou seja, 25, caso contrário, o treinamento seria invalidado.

Nas figuras 13, 14 e 15, a simulação foi repetida alterando-se apenas a temperatura de entrada dos reagentes para 220 °C. Nestes dois casos, as condições de operação contêm dados não apresentados à rede durante o treinamento.

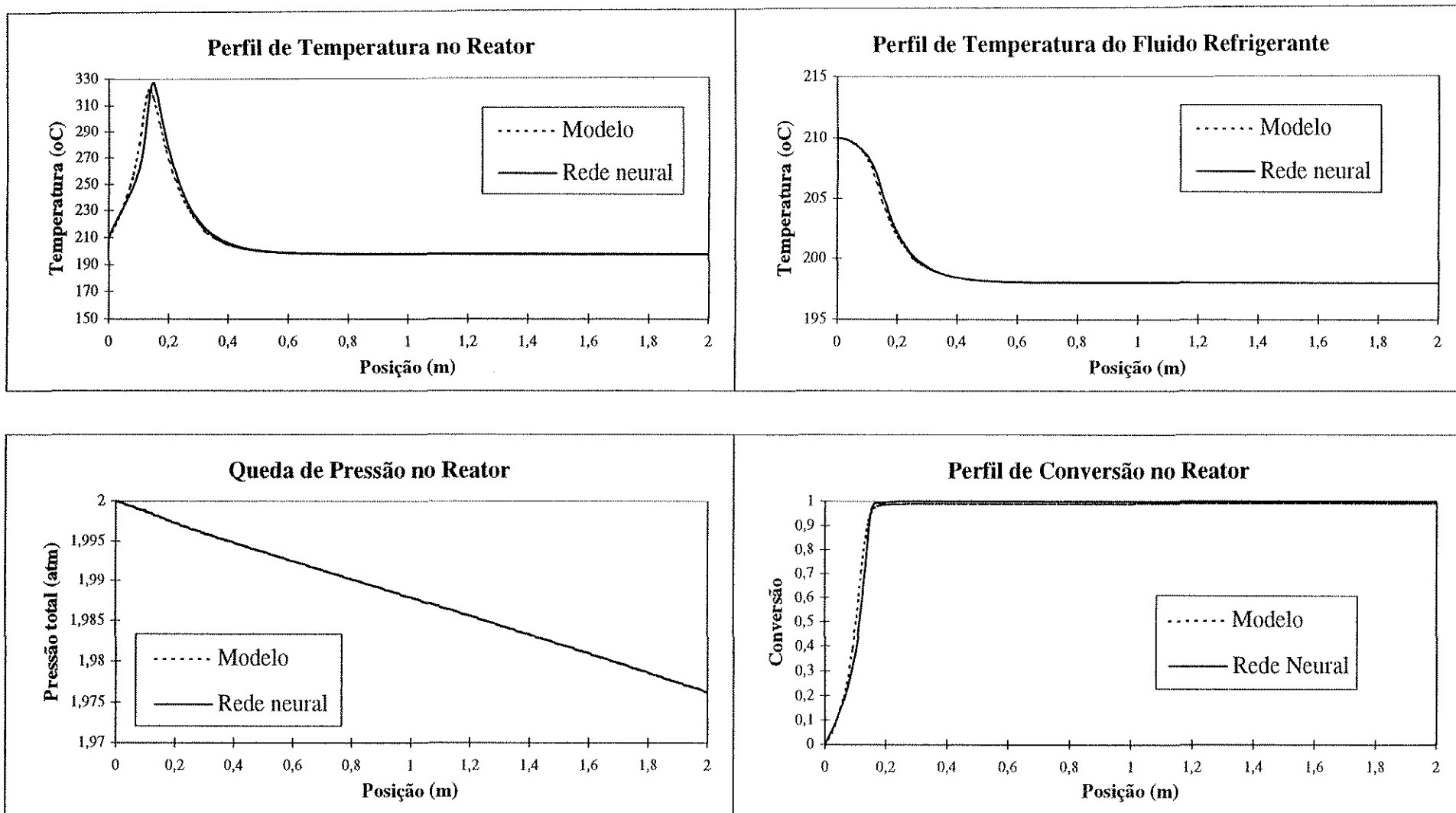
Diversas simulações foram realizadas para comparação dos dois softwares e ficou claro que o simulador com a rede neural apresentou bons resultados (perfis próximos aos gerados pela equação da taxa) quando a temperatura de entrada dos reagentes manteve-se entre 205 e 230 °C e a pressão total na entrada entre 1,8 e 2,0 atm. Esta limitação se deve ao modo como o treinamento foi realizado (orientado) no entanto, esta é a faixa de interesse para a otimização do processo pois com temperaturas inferiores a 205 °C a conversão começa a declinar abaixo dos 0,9 e com temperaturas superiores a 230 °C o “ponto quente” do reator é muito alto gerando problemas de segurança e degradação do catalisador.

Figura 10: Gráficos com perfis gerados na simulação do reator utilizando a equação da taxa (modelo) e rede neural
Configuração Co-corrente



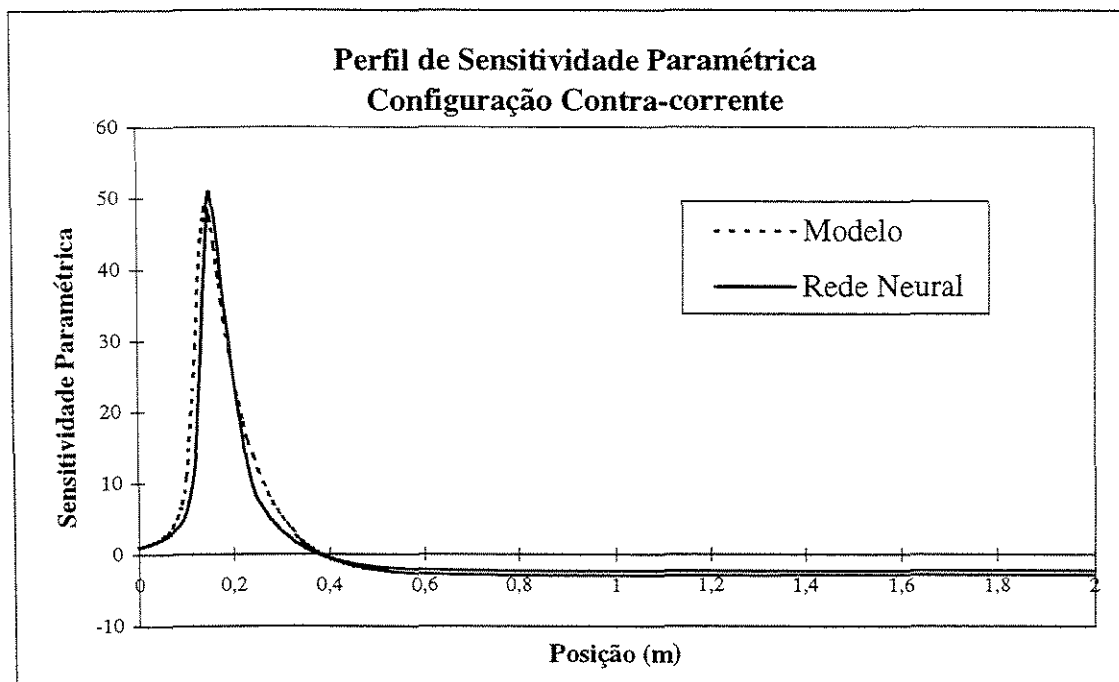
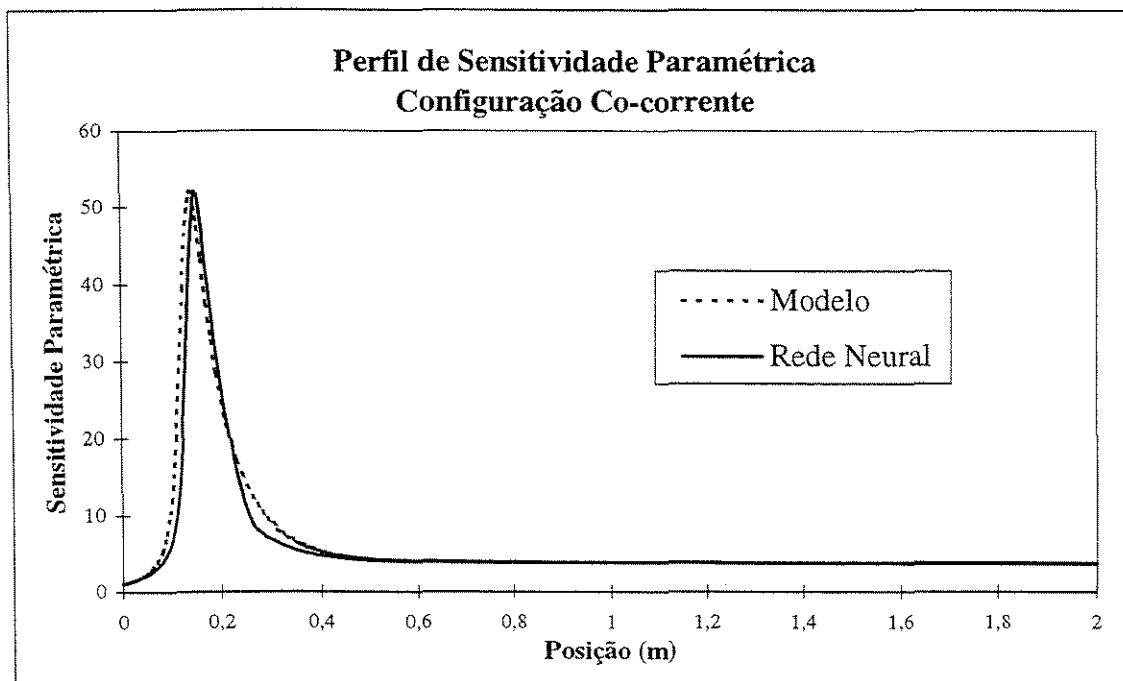
Dados: Vazão de reagentes: 4.000 kg/h.m² ; Vazão de refrigerante: 30 kg/h; Temperatura de entrada dos reagentes: 210 oC; Temperatura de entrada do refrigerante: 210 oC

Figura 11: Gráficos com perfis gerados na simulação do reator utilizando a equação da taxa (modelo) e rede neural
Configuração Contra-corrente



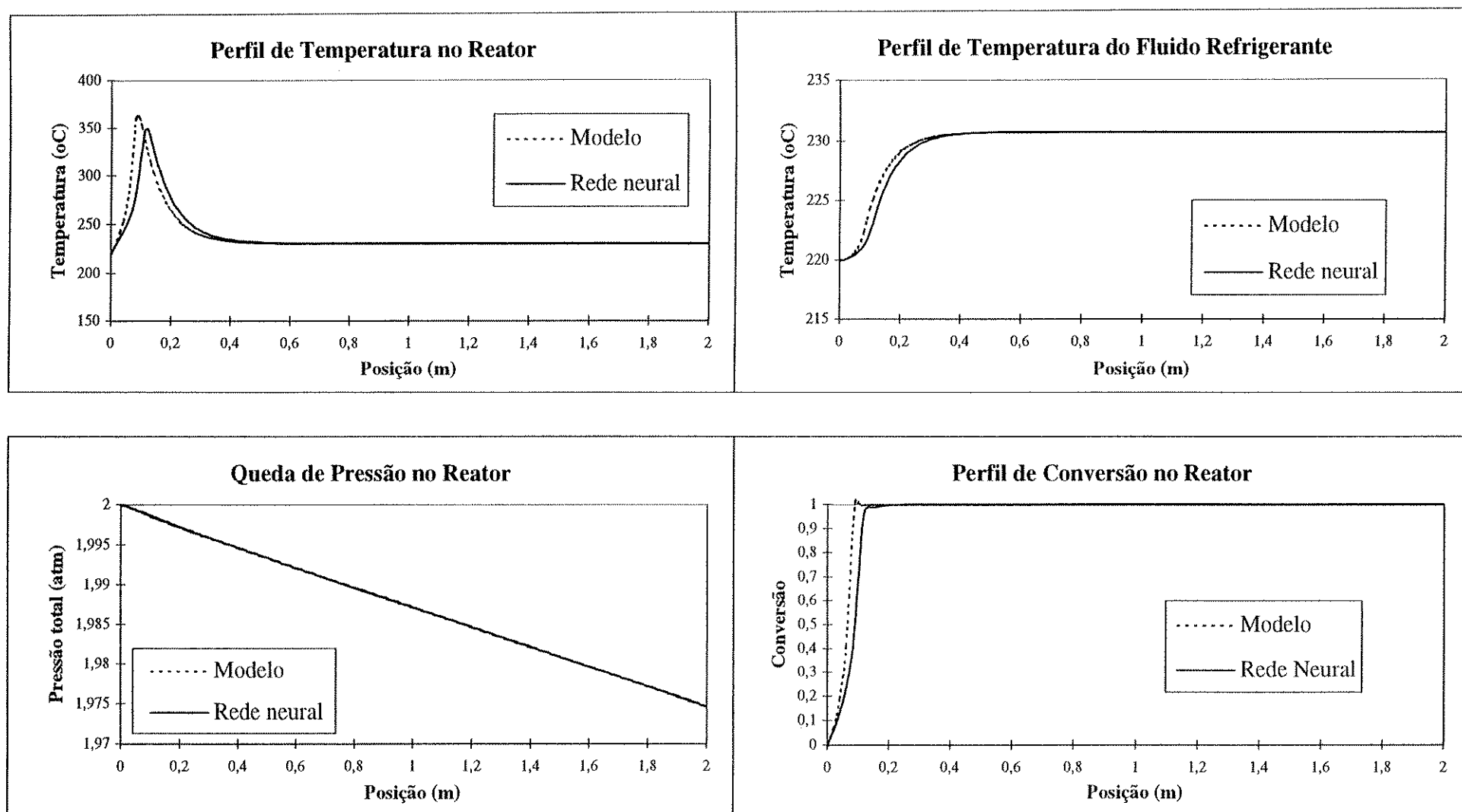
Dados: Vazão de reagentes: 4.000 kg/h.m² ; Vazão de refrigerante: 30 kg/h; Temperatura de entrada dos reagentes: 210 oC; Temperatura de entrada do refrigerante: 198 oC

Figura 12: Gráficos com perfis de sensibilidade paramétrica gerados na simulação do reator utilizando a equação da taxa (modelo) e rede neural



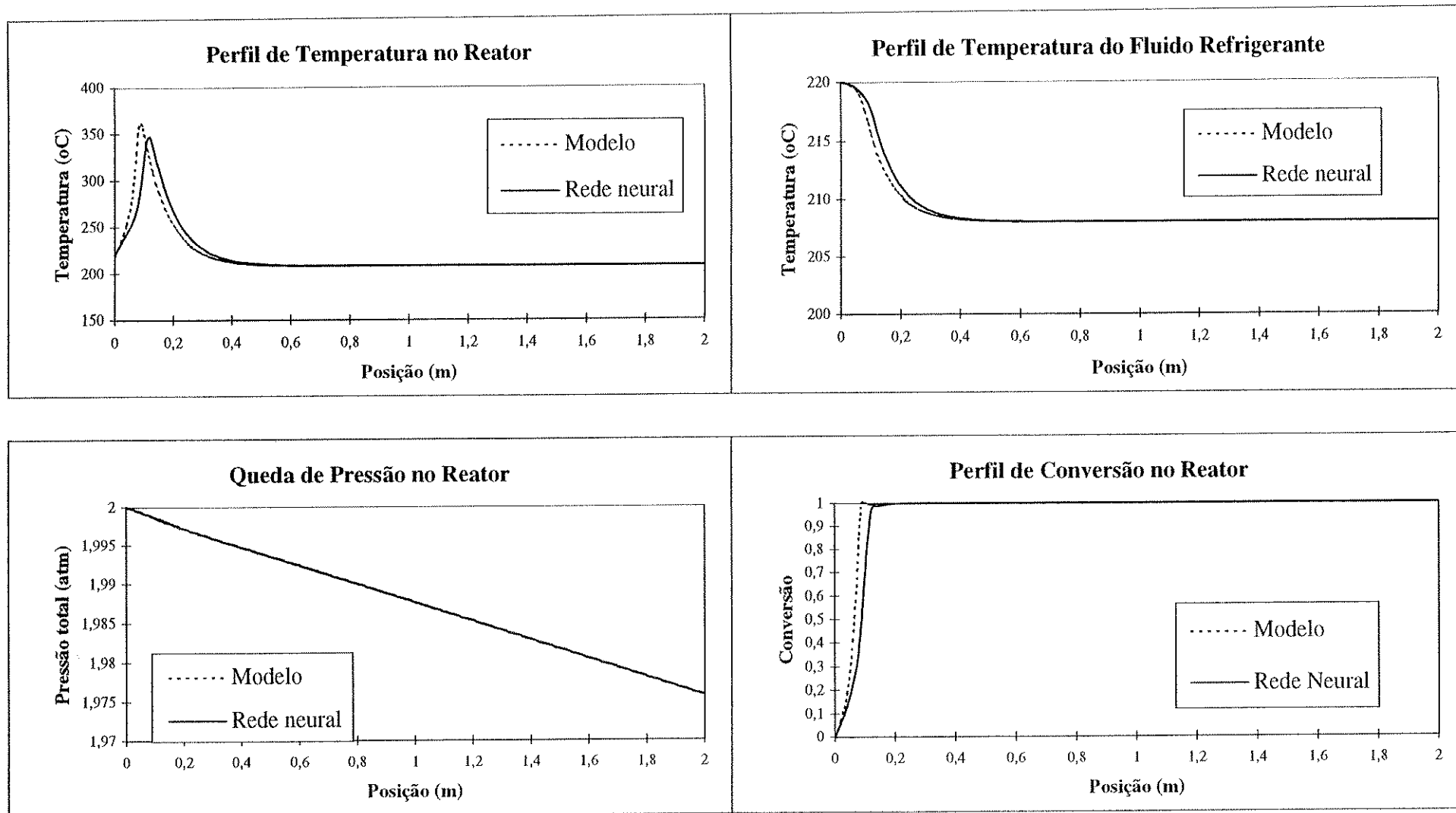
Dados: Idem a figura 10 (Co-corrente) e 11 (Contra-corrente).

Figura 13: Gráficos com perfis gerados na simulação do reator utilizando a equação da taxa (modelo) e rede neural
Configuração Co-corrente



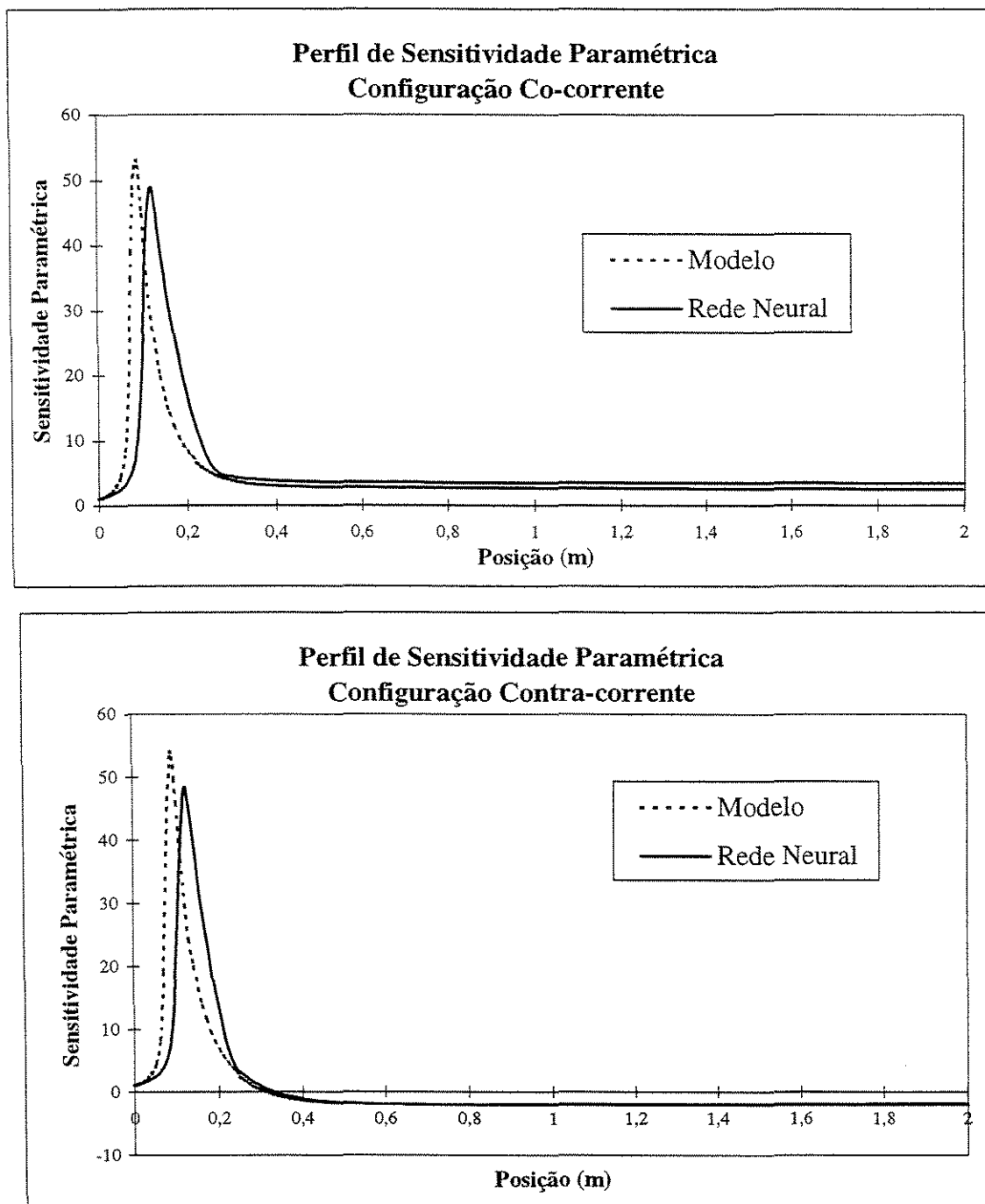
Dados: Vazão de reagentes: 4.000 kg/h.m² ; Vazão de refrigerante: 30 kg/h; Temperatura de entrada dos reagentes: 220 oC; Temperatura de entrada do refrigerante: 220 oC

Figura 14: Gráficos com perfis gerados na simulação do reator utilizando a equação da taxa (modelo) e rede neural
Configuração Contra-corrente



Dados: Vazão de reagentes: 4.000 kg/h.m² ; Vazão de refrigerante: 30 kg/h; Temperatura de entrada dos reagentes: 220 oC; Temperatura de entrada do refrigerante: 208 oC

Figura 15: Gráficos com perfis de sensibilidade paramétrica gerados na simulação do reator utilizando a equação da taxa (modelo) e rede neural



Dados: Idem a figura 13 (Co-corrente) e 14 (Contra-corrente)

9.2. PARÂMETROS PARA O SISTEMA ESPECIALISTA

Para executar o sistema especialista, é necessário estabelecer os intervalos das variáveis de operação e projeto para as sub-rotinas de estudo (tabela 8) e os limites de segurança para os módulos de alarme (tabela 9).

Tabela 8: Intervalos dos dados de entrada para o Sistema Especialista.

Dados de projeto	Intervalo	Un.
Diâmetro interno do reator	10 a 40	mm
Diâmetro da partícula de catalisador	1 a 5	mm
Pressão à entrada	1,8 a 2,0	atm
Dados de operação		
Vazão de reagentes	3.000 a 5.000	kg/h.m ²
Vazão de refrigerante	20 a 50	kg/h
Temperatura dos reagentes	190 a 230	°C

Tabela 9: Limites de segurança para os módulos de alarme.

Parâmetro	Limite	Unidade
Limite de degradação do catalisador ⁽¹⁾	281	°C
Etanol		
Temperatura de auto-ignição ⁽²⁾	423	°C
Limite inferior de flamabilidade ⁽²⁾	4,3	%
Limite superior de flamabilidade ⁽²⁾	19,0	%
Acetaldeído		
Temperatura de auto-ignição ⁽²⁾	130	°C
Limite inferior de flamabilidade ⁽²⁾	4,0	%
Limite superior de flamabilidade ⁽²⁾	60,0	%
Conversão mínima especificada	0,98	
Máxima queda de pressão permitida	0,1	atm

(1) 1,1 x Temperatura de degradação do catalisador, obtida de [3];

(2) Fonte: banco de dados DIPPR.

9.3. ESTUDO DAS VARIÁVEIS DE OPERAÇÃO E PROJETO

Utilizando os valores da simulação principal (tabela 7) e os intervalos da tabela 8, o Sistema Especialista realizou o Estudo das Variáveis de Operação e Projeto, fornecendo em cada caso simulado a temperatura máxima no reator, a temperatura média, a conversão final, a queda de pressão e a sensibilidade paramétrica máxima. Com os valores obtidos pode-se montar os gráficos para análise mostrados nas figuras 16 a 27 (figuras 16 a 21 para a configuração co-corrente e figuras 22 a 27 para a configuração contra-corrente) .

O Sistema Especialista realizou este estudo executando tanto o software REATOR.FOR quanto o software REDEREAT.FOR para apresentar uma comparação entre a simulação com a equação da taxa e com a rede neural, cujos resultados foram mostrados nos mesmos gráficos (símbolos vazados para “rede neural” e símbolos cheios para “modelo”).

De um modo geral os resultados do estudo das variáveis de operação e projeto com a rede neural se aproximaram aos resultados das simulações com a equação da taxa (modelo), em condições próximas aos dados de treinamento (temperatura de entrada entre 205 e 230 °C e pressão entre 1,8 e 2,0 atm).

Os valores da temperatura média do reator prevista pela rede também estiveram muito próximos àqueles calculados na simulação com a equação da taxa. As maiores diferenças no perfil de temperatura calculados pelos dois métodos está na região do ponto quente, sendo que nas regiões de entrada e saída do reator os valores de temperatura são praticamente idênticos.

Observou-se comportamento semelhante entre a rede neural e o modelo quanto à variação da temperatura máxima em relação aos parâmetros estudados. A diferença entre os valores estimados pela rede e pelo modelo para uma mesma condição ficou abaixo de 25 °C.

Quanto ao comportamento dos valores de conversão em função dos parâmetros estudados, também observou-se semelhança entre a rede e o modelo. No entanto, quando a vazão de reagentes foi variada, a rede neural não apresentou sensibilidade para conversões entre 0,95 e 1,0.

Para diâmetro interno do reator inferior a 20 mm, a conversão prevista pela rede foi muito inferior à calculada pela equação da taxa pois nestes casos, o perfil de temperatura no reator é muito mais ameno que nos casos apresentados no treinamento da rede.

Os valores de sensibilidade paramétrica máxima e queda de pressão calculados pela rede estiveram coerentes com aqueles previstos pelo modelo.

Com base nas comparações entre a rede e o modelo, pode-se determinar os intervalos onde a estimativa da taxa pela rede neural é válida: 205 a 230 °C para a temperatura de entrada dos gases; 3000 a 4500 kg/h.m² para a vazão dos reagentes; 20 a 50 kg/h para a vazão de refrigerante; 25 a 40 mm para o diâmetro do reator; 1,5 a 2,5 mm e 4,0 a 5,0 mm para o diâmetro da partícula catalisadora e 1,8 a 2,0 atm para a pressão total.

9.3.1. Configuração Co-corrente

Estudo da Temperatura de Entrada no Reator (figura 16)

Os valores de temperatura média e queda de pressão apresentados pelo modelo e pela rede neural foram praticamente idênticos.

Para temperatura de entrada entre 197 e 210 °C, a temperatura máxima no reator prevista pela rede foi maior que a prevista pelo modelo, sendo que a diferença chegou a 20 °C para temperatura de entrada de 205 °C. Acima de 210 °C, o efeito foi inverso, com uma diferença de 25 °C no limite superior de 230 °C. Entre 190 e 197 °C a diferença rede-modelo foi pequena (<5°C).

A conversão final pela rede neural apresentou valores muito próximos aos do modelo, acima de temperatura de entrada de 200 °C. Abaixo deste limite, a conversão estimada pela rede foi muito inferior à calculada pelo modelo.

Os valores de sensibilidade paramétrica máxima calculados pelo o software com a rede neural acompanharam aqueles previstos pelo modelo, ambos mostrando um ponto de máximo, porém deslocados (para rede, máximo de 50 ocorre em 210 °C e para o modelo o máximo de 58 ocorre em 215°C).

Estudo da Vazão de Reagentes (figura 17):

Os valores de temperatura média, conversão, queda de pressão e sensibilidade paramétrica máxima apresentados pelo modelo e pela rede neural foram praticamente idênticos.

Para vazão de reagentes inferior a 3800 kg/h.m², a temperatura máxima no reator prevista pela rede foi menor que a prevista pelo modelo, sendo que a diferença chegou a 7 °C no limite inferior da abscissa. Acima de 3800 kg/h.m² o efeito foi inverso, com uma diferença de 12 °C no limite superior.

Estudo da Vazão de Refrigerante (figura 18):

Os valores de temperatura média, conversão e queda de pressão apresentados pelo modelo e pela rede neural foram praticamente idênticos.

As temperaturas máximas previstas pela rede acompanharam os valores previstos pelo modelo, com uma diferença entre 1 e 3 °C (maiores valores para a rede neural).

Os valores de sensibilidade paramétrica máxima calculados pelo software com a rede neural acompanharam aqueles previstos pelo modelo. A diferença entre os valores foi muito pequena (inferior a 1).

Estudo do Diâmetro Interno do Reator (figura 19):

Os valores de temperatura média e queda de pressão apresentados pelo modelo e pela rede neural foram praticamente idênticos no intervalo entre 20 e 35 mm..

As temperaturas máximas previstas pela rede acompanharam os valores previstos pelo modelo, com uma diferença máxima de 20 °C no intervalo de 20 a 25 mm e de 10 °C no intervalo de 30 a 40 mm.

A conversão final pela rede neural diferiu muito daquela apresentada pelo modelo para a faixa de diâmetro de 10 a 20 mm. Acima deste intervalo, a conversão foi alta e não variou com o diâmetro, havendo igualdade entre os valores do modelo e da rede.

Os valores de sensibilidade paramétrica máxima calculados pelo software com a rede neural acompanharam aqueles previstos pelo modelo.

Estudo do Diâmetro da Partícula Catalisadora (figura 20):

Os valores de temperatura média e queda de pressão apresentados pelo modelo e pela rede neural foram praticamente idênticos.

As temperaturas máximas previstas pela rede acompanharam os valores previstos pelo modelo, com uma diferença máxima de 5 °C no intervalo de 2 a 4 mm.

A conversão final não apresentou variação sensível no intervalo estudado, havendo igualdade dos valores da rede com o modelo.

Os valores de sensibilidade paramétrica máxima calculados pelo software com a rede neural acompanharam aqueles previstos pelo modelo. A diferença entre os valores foi muito pequena (inferior a 5).

Estudo da Pressão Total (figura 21):

Os valores de temperatura média, queda de pressão e sensibilidade paramétrica máxima apresentados pelo modelo e pela rede neural foram praticamente idênticos.

As temperaturas máximas previstas pela rede acompanharam os valores previstos pelo modelo, com uma diferença máxima de 4 °C.

A conversão final calculada pelo modelo não apresentou variação sensível no intervalo estudado. Observou-se pequena diminuição da conversão estimada pela rede à medida que a pressão foi reduzida de 2,0 para 1,8 atm, no entanto, a diferença não chegou a 0,005.

9.3.2. Configuração Contra-corrente

Estudo da Temperatura de Entrada no Reator (figura 22):

Os valores de temperatura média e queda de pressão apresentados pelo modelo e pela rede neural foram praticamente idênticos.

As temperaturas máximas previstas pela rede acompanharam os valores previstos pelo modelo, com uma diferença máxima de 25 °C no extremo de 230 °C.

A conversão final pela rede neural apresentou os mesmos valores do modelo acima de temperatura de entrada de 205 °C. Abaixo desta temperatura, houve grande discrepância.

Os valores de sensibilidade paramétrica máxima calculados pelo software com a rede neural acompanharam aqueles previstos pelo modelo, ambos mostrando um aumento acentuado (3 a 50) da sensibilidade máxima entre 190 e 210 °C, seguido de uma leve queda. No intervalo de 205 a 210 °C observou-se as maiores diferenças, da ordem de 20.

Estudo da Vazão de Reagentes (figura 23):

Os valores de temperatura média, queda de pressão e sensibilidade paramétrica máxima apresentados pelo modelo e pela rede neural foram praticamente idênticos.

Para vazão de reagentes inferior a 3700 kg/h.m^2 , a temperatura máxima no reator prevista pela rede foi menor que a prevista pelo modelo, sendo que a diferença chegou a 5°C no limite inferior da abscissa. Acima de 3700 kg/h.m^2 o efeito foi inverso, com uma diferença de 16°C no limite superior.

A conversão prevista pela rede não apresentou variação no intervalo estudado, o que não ocorre no caso do modelo. A diferença com o modelo aumentou conforme a vazão foi aumentada (de zero para vazão de 3.000 kg/h.m^2 , até 0,04 para vazão de 5.000 kg/h.m^2).

Estudo da Vazão de Refrigerante (figura 24):

Os valores de temperatura média e queda de pressão apresentados pelo modelo e pela rede neural foram praticamente idênticos.

As temperaturas máximas previstas pela rede acompanharam os valores previstos pelo modelo, com uma diferença de 6°C (maiores valores para a rede neural).

A conversão final pela rede neural não variou, enquanto que o modelo mostrou um ligeiro aumento com o aumento da vazão de refrigerante, chegando a valores até 0,01 abaixo dos estimados pela rede neural.

Os valores de sensibilidade paramétrica máxima calculados pelo software com a rede neural acompanharam aqueles previstos pelo modelo. A diferença entre os valores foi muito pequena (inferior a 3).

Estudo do Diâmetro Interno do Reator (figura 25):

Os valores de temperatura média e queda de pressão apresentados pelo modelo e pela rede neural foram praticamente idênticos no intervalo entre 20 e 40 mm..

As temperaturas máximas previstas pela rede acompanharam os valores previstos pelo modelo, com uma diferença máxima de 20 °C no intervalo de 20 a 25 mm e de 10 °C no intervalo de 30 a 40 mm.

A conversão final pela rede neural apresentou diferenças acentuadas com relação ao modelo para a faixa de diâmetro de 10 a 25 mm. Acima deste intervalo, a conversão foi alta e não variou com o diâmetro, havendo igualdade entre os valores do modelo e da rede.

Os valores de sensibilidade paramétrica máxima calculados pelo software com a rede neural acompanharam aqueles previstos pelo modelo.

Estudo do Diâmetro da Partícula Catalisadora (figura 26):

Os valores de temperatura média e queda de pressão apresentados pelo modelo e pela rede neural foram praticamente idênticos.

As temperaturas máximas previstas pela rede acompanharam os valores previstos pelo modelo, com uma diferença máxima de 8 °C no intervalo de 2 a 4 mm.

A conversão final prevista pela rede não apresentou variação sensível no intervalo estudado, enquanto os valores previstos pelo modelo apresentaram um mínimo próximo a 30 mm. A diferença rede-modelo foi mínima nos extremos (1 mm e 5 mm) e máxima no centro do intervalo (3 mm), chegando a 0,01.

Os valores de sensibilidade paramétrica máxima calculados pelo software com a rede neural acompanharam aqueles previstos pelo modelo. A diferença entre os valores foi muito pequena (inferior a 5).

Estudo da Pressão Total (figura 27):

Os valores de temperatura média e queda de pressão apresentados pelo modelo e pela rede neural foram praticamente idênticos.

As temperaturas máximas previstas pela rede acompanharam os valores previstos pelo modelo, com uma diferença máxima de 10 °C.

A conversão final prevista pela rede seguiu a tendência da conversão calculada pelo modelo, com uma diferença de 0,01.

A sensibilidade paramétrica máxima calculados pelo software com a rede neural acompanharam aqueles previstos pelo modelo com uma pequena diferença entre os valores (inferior a 3, exceto para o extremo inferior de 1,8 atm, onde a diferença chegou a 8).

Figura 16: Estudo das Variáveis de Operação - Temperatura de Entrada dos Reagentes (Configuração Co-corrente)
Comparação Modelo x Rede Neural

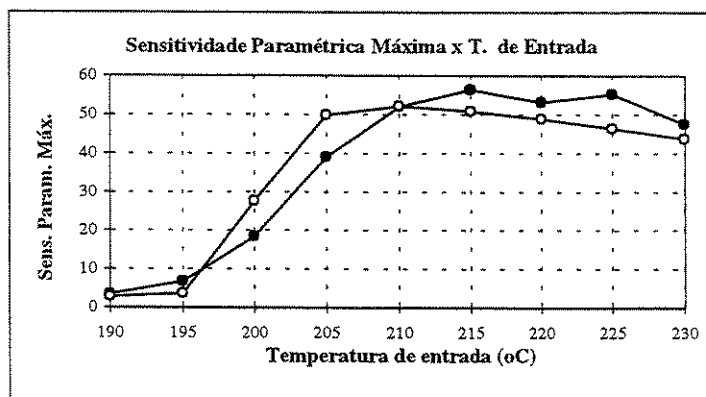
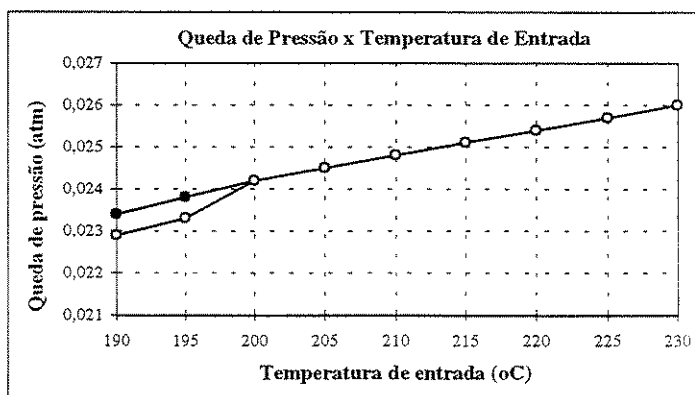
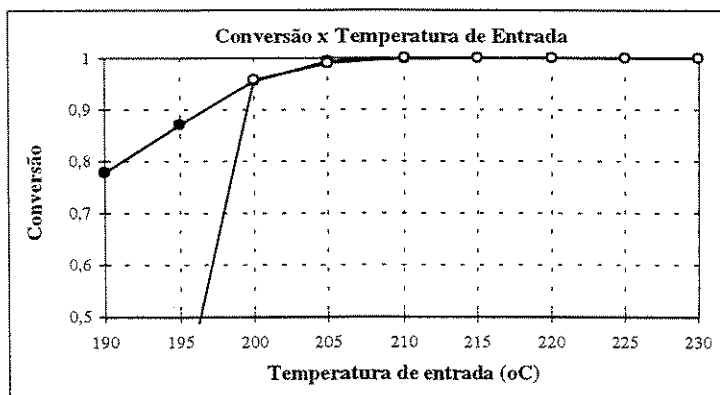
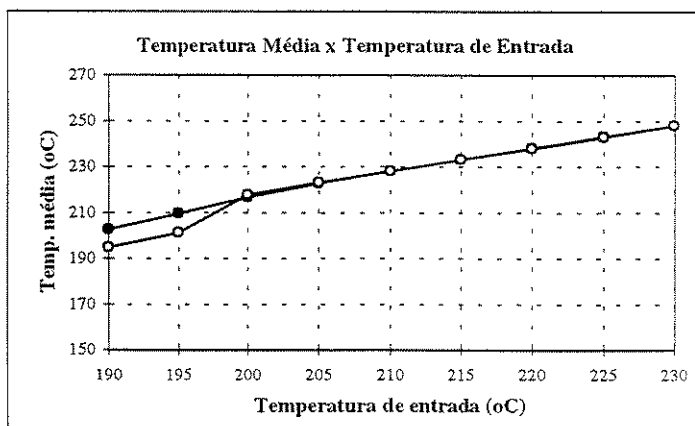
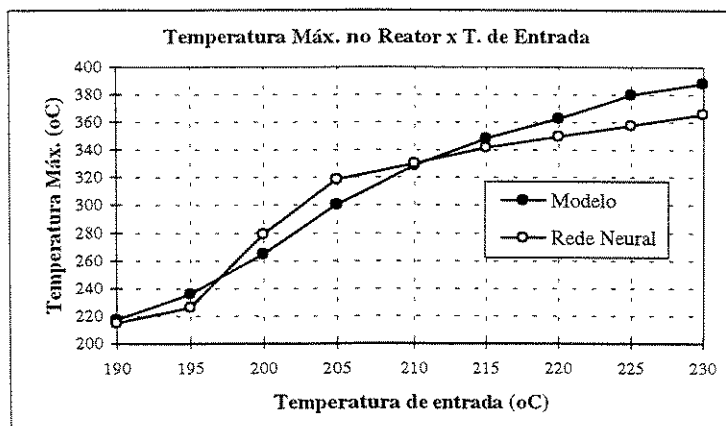


Figura 17: Estudo das Variáveis de Operação - Vazão de Reagentes (Configuração Co-corrente)
Comparação Modelo x Rede Neural

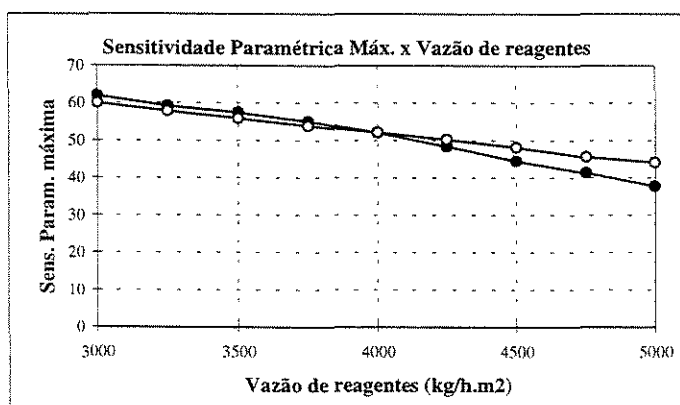
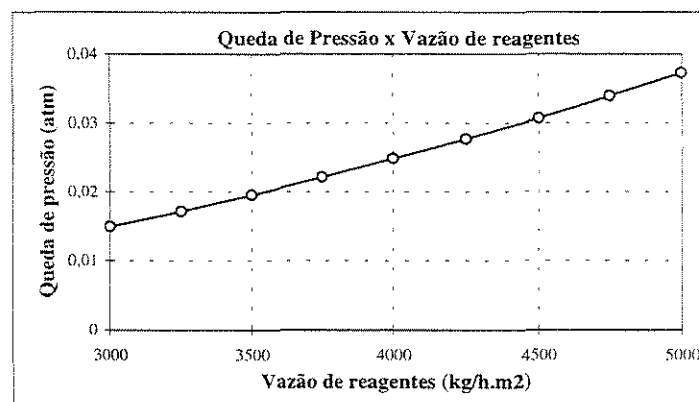
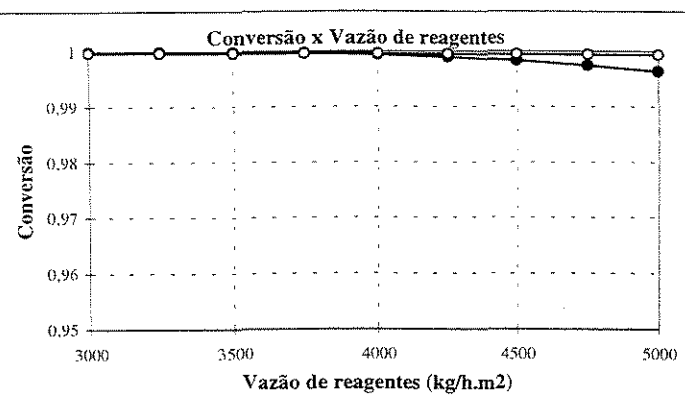
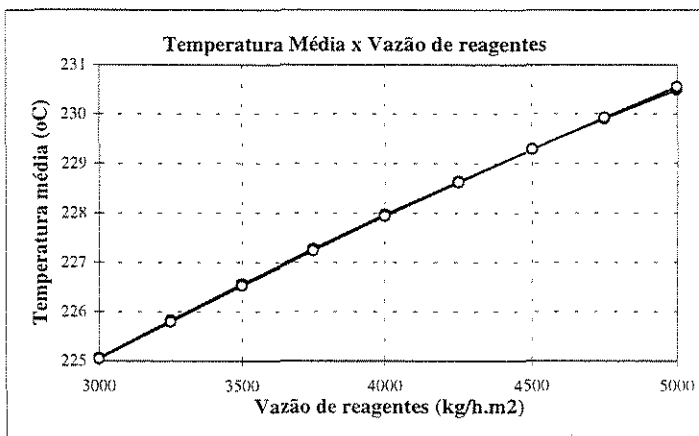
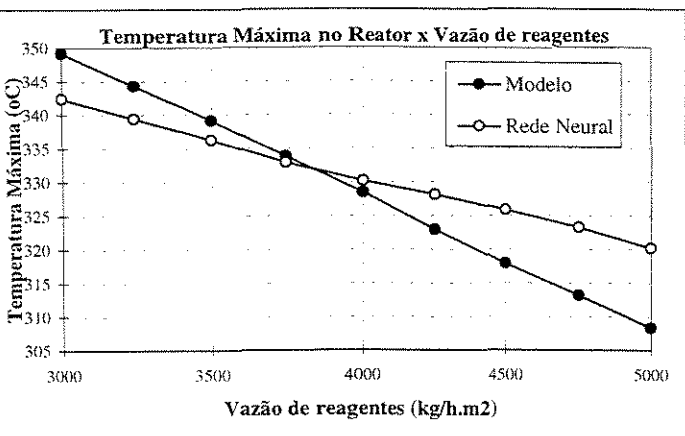


Figura 18: Estudo das Variáveis de Operação - Vazão de Refrigerante (Configuração Co-corrente)
 Comparação Modelo x Rede Neural

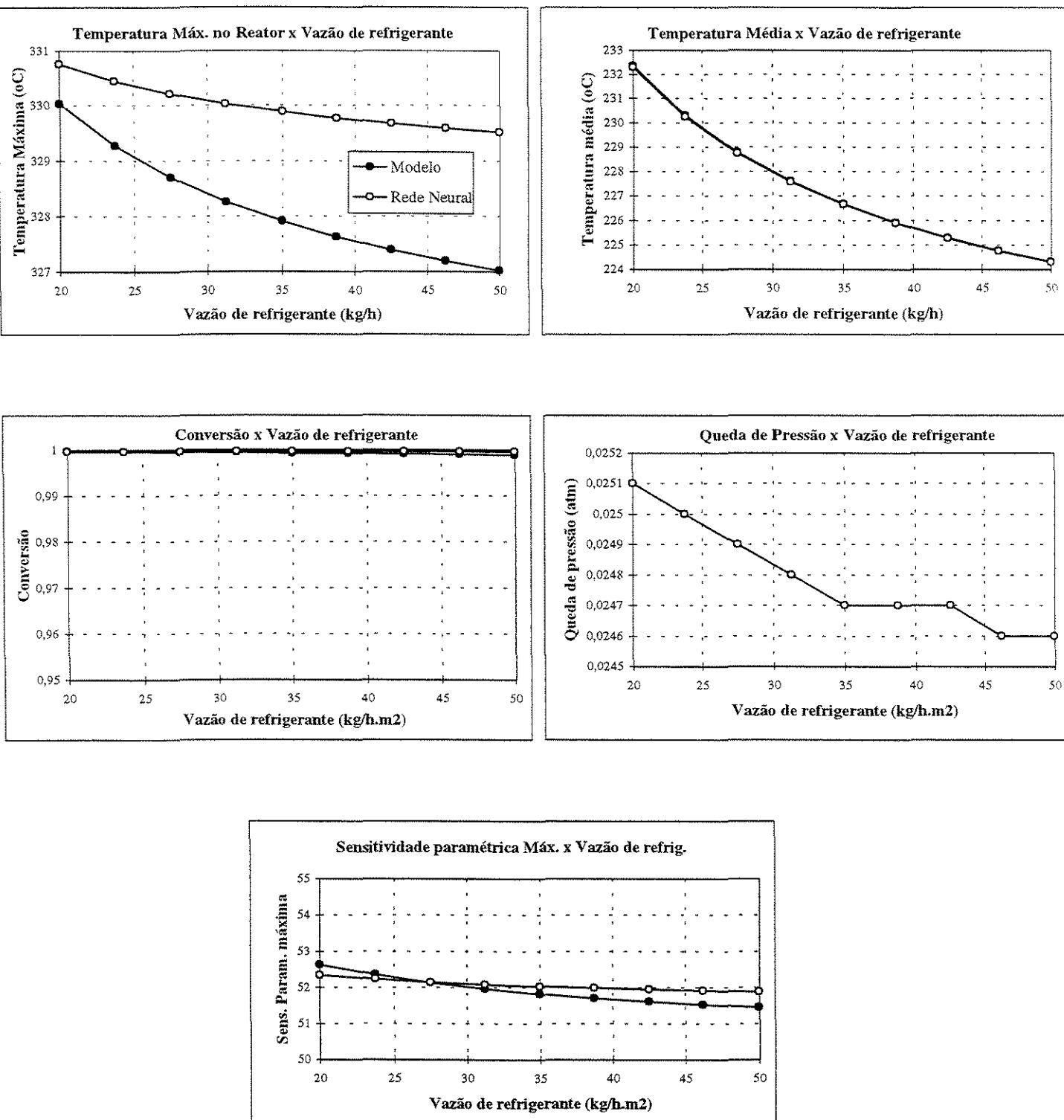


Figura 19: Estudo das Variáveis de Projeto - Diâmetro Interno do Reator (Configuração Co-corrente)
Comparação Modelo x Rede Neural

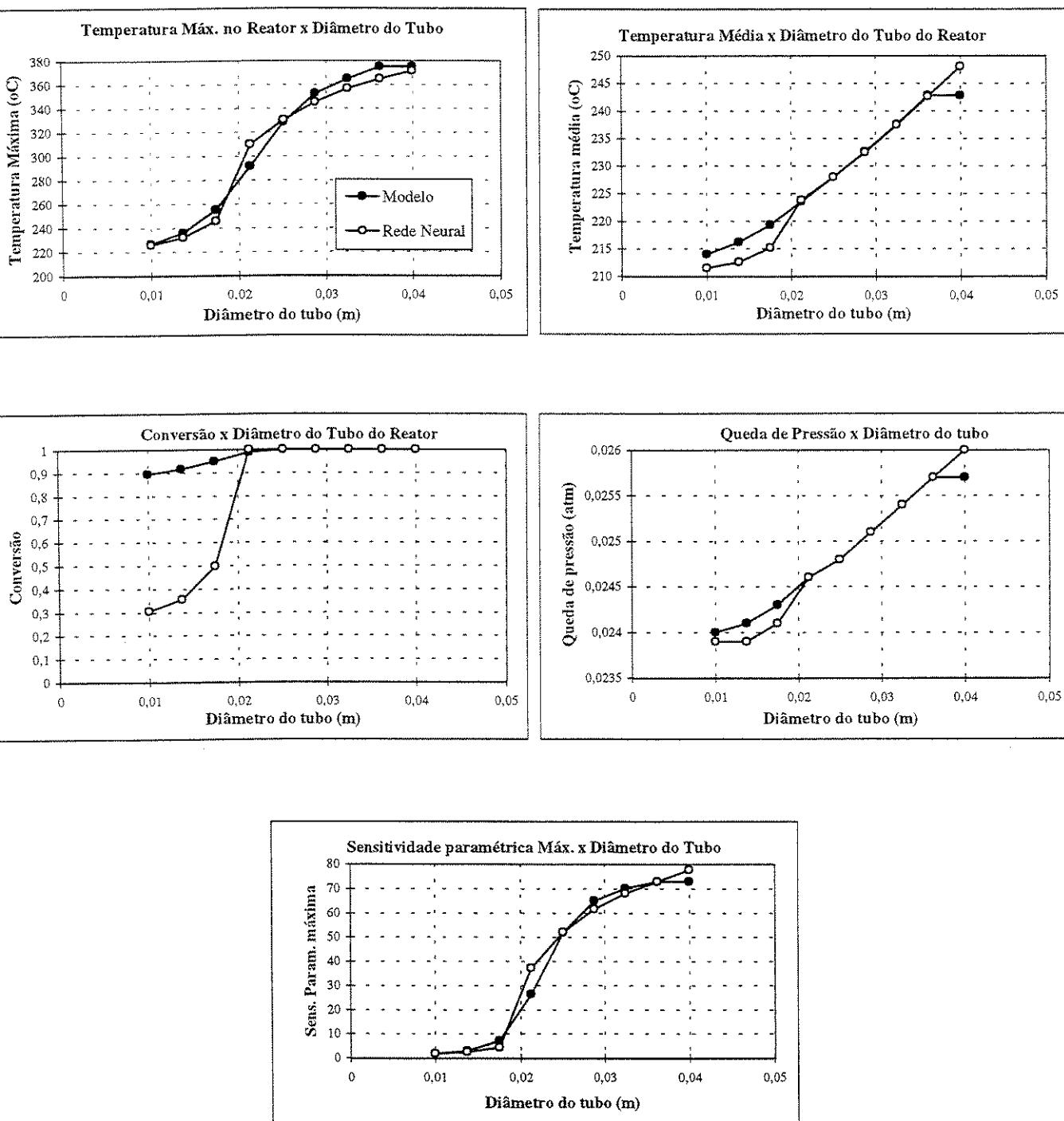


Figura 20: Estudo das Variáveis de Projeto - Diâmetro da Partícula de Catalisador (Configuração Co-corrente)
Comparação Modelo x Rede Neural

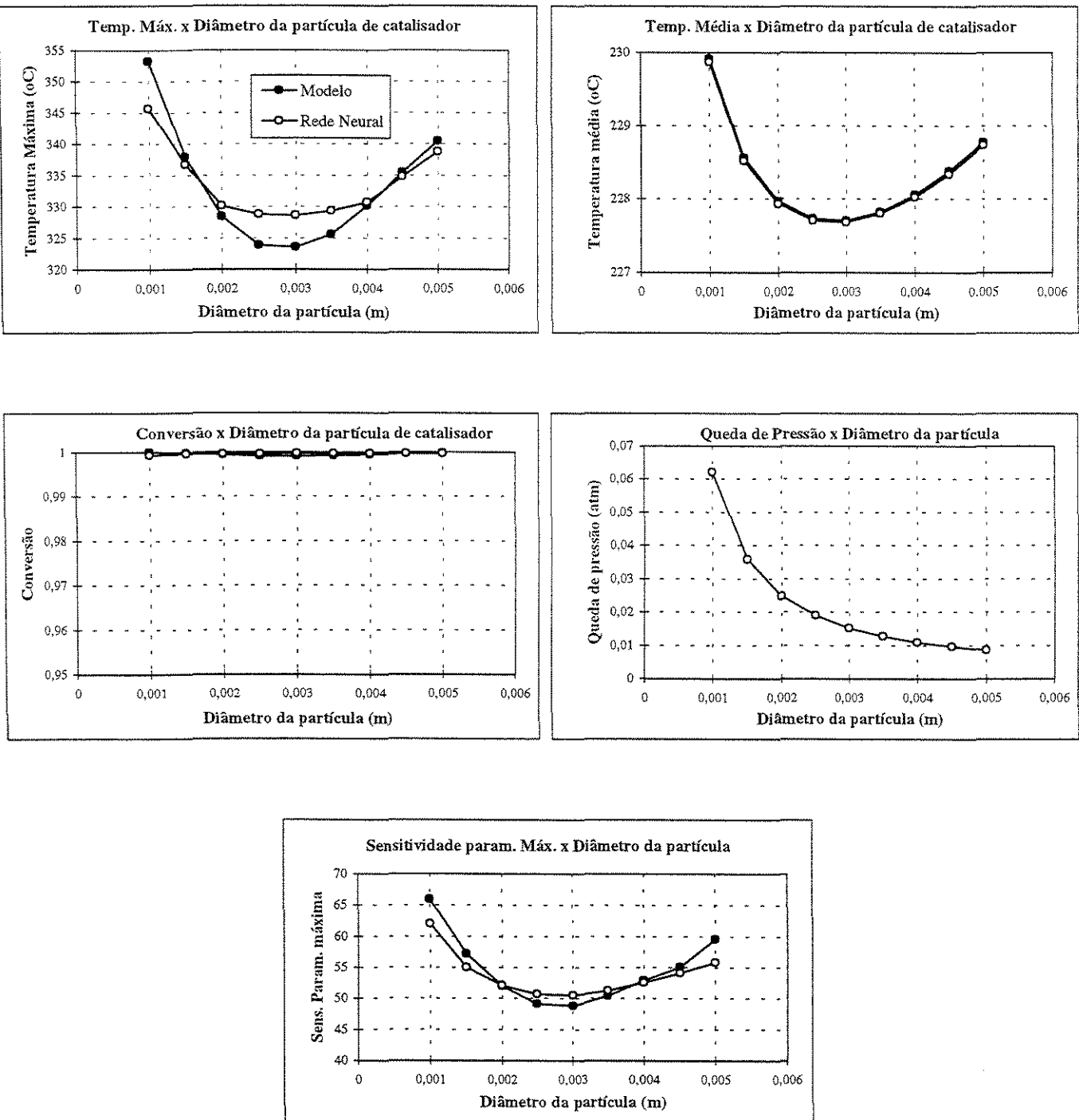


Figura 21: Estudo das Variáveis de Projeto - Pressão Total na Entrada (Configuração Co-corrente)
Comparação Modelo x Rede Neural

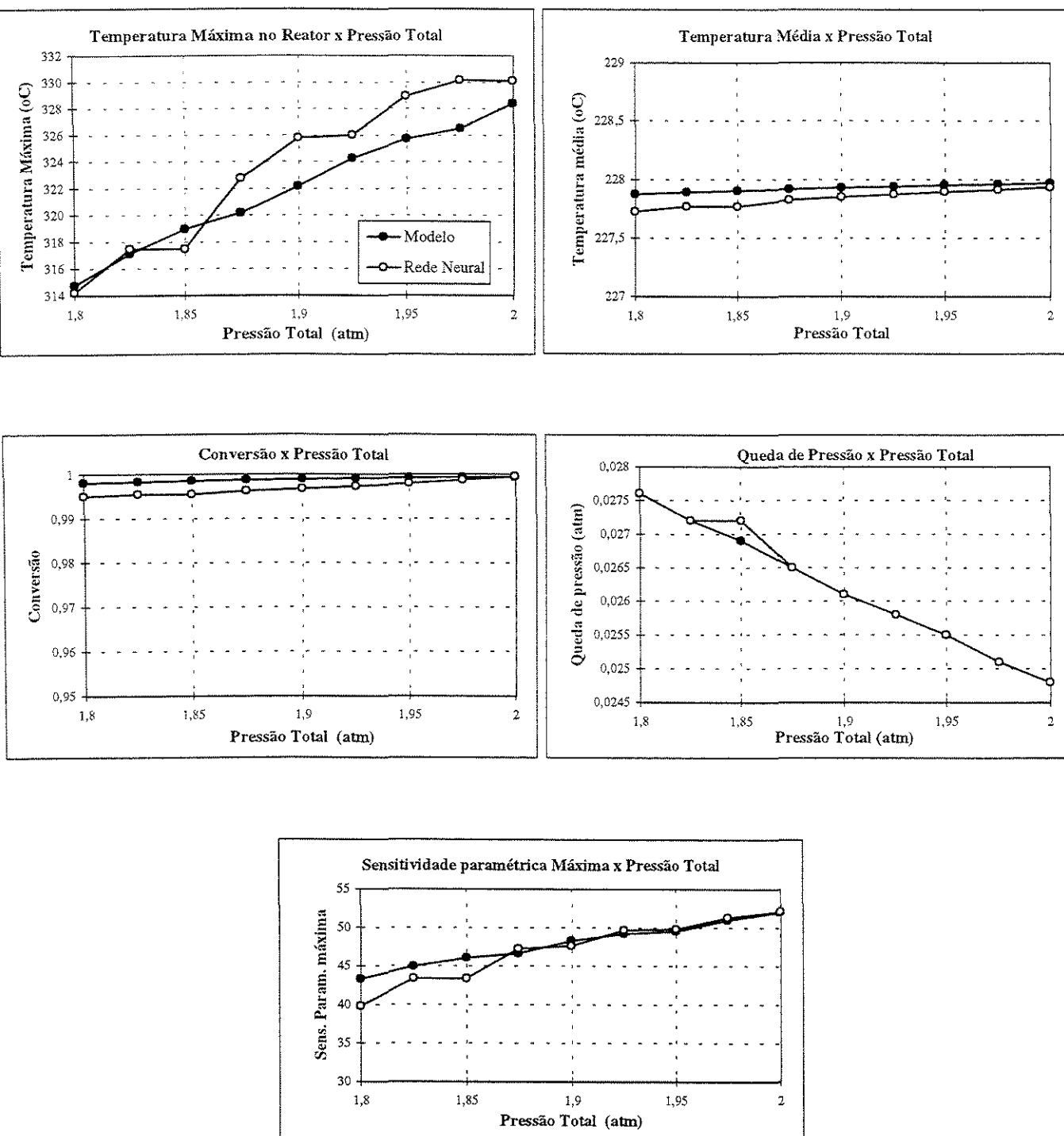


Figura 22: Estudo das Variáveis de Operação - Temperatura de Entrada dos Reagentes (Configuração Contra-corrente)
 Comparação Modelo x Rede Neural

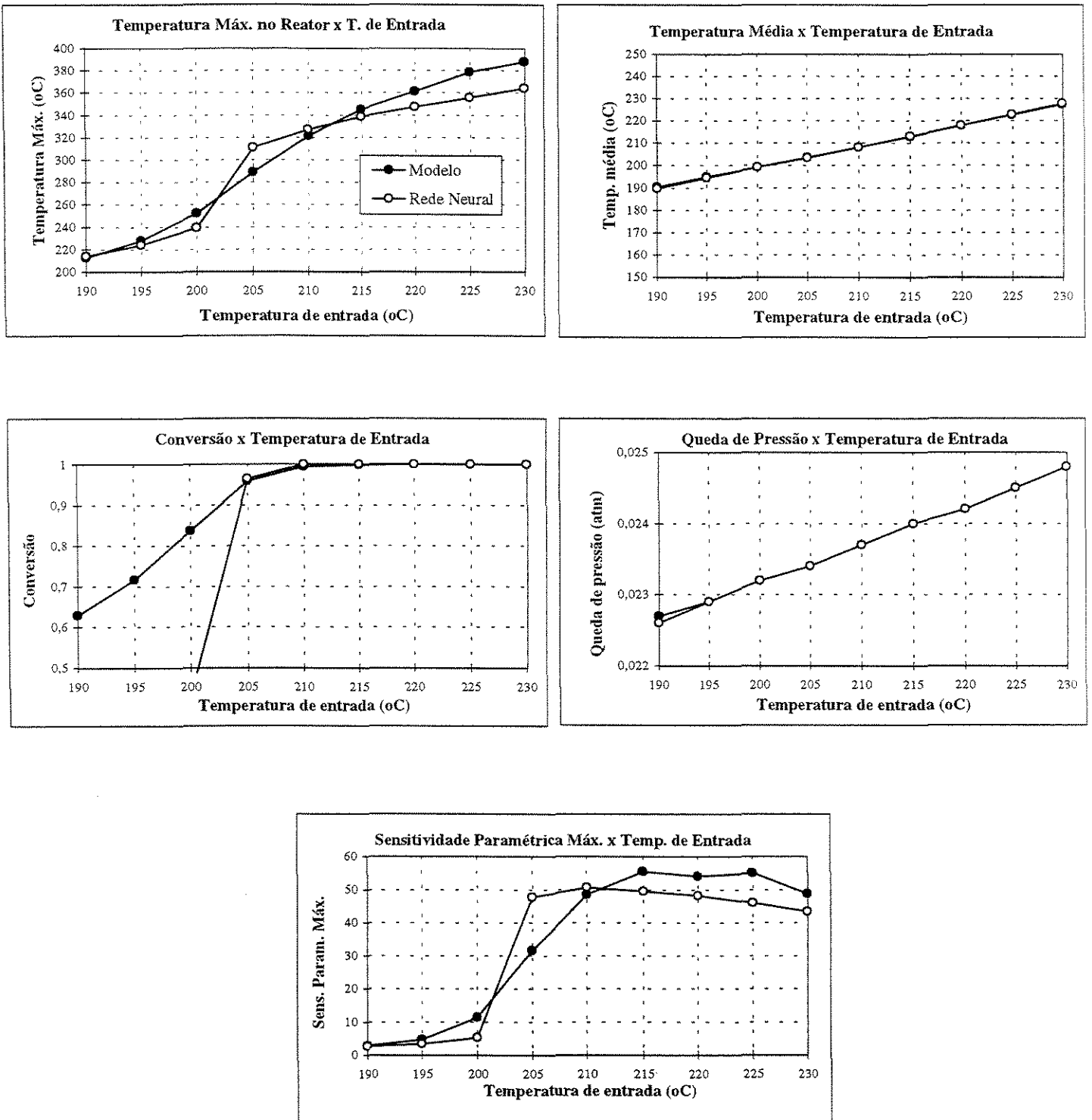


Figura 23: Estudo das Variáveis de Operação - Vazão de Reagentes (Configuração Contra-corrente)
Comparação Modelo x Rede Neural

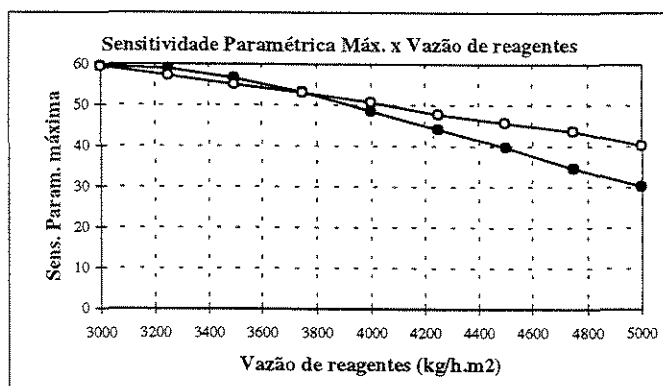
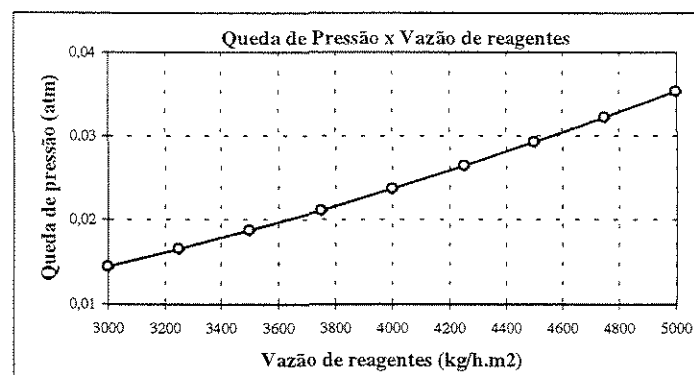
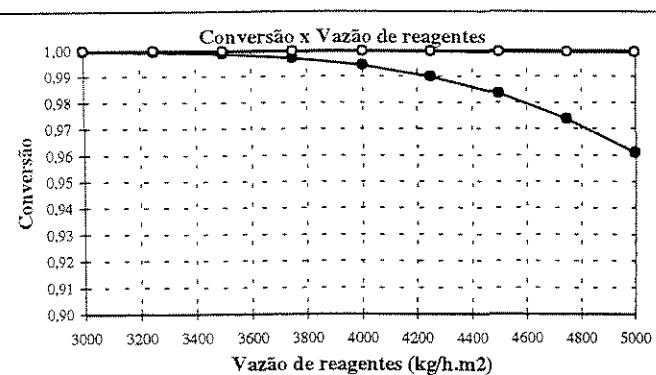
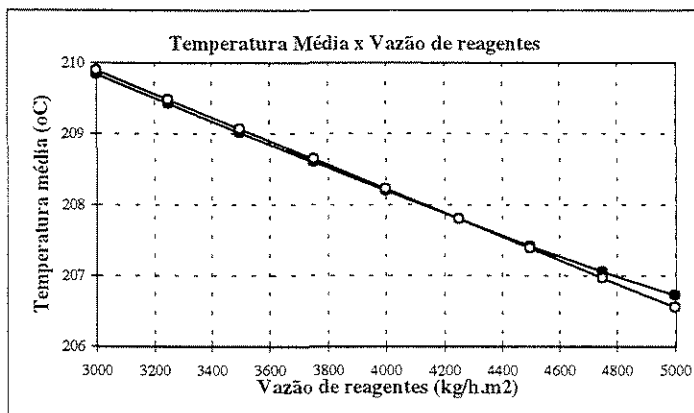
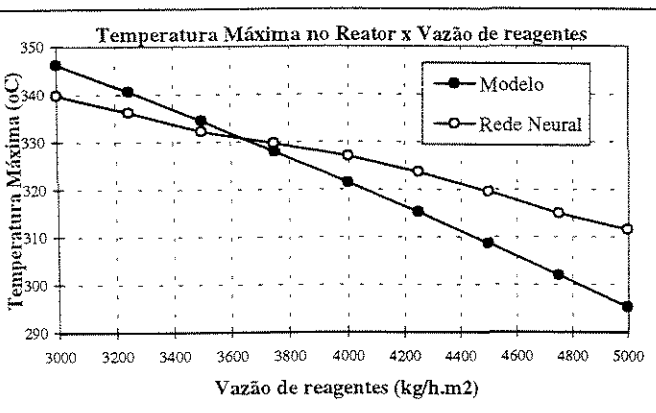


Figura 24: Estudo das Variáveis de Operação - Vazão de Refrigerante (Configuração Contra-corrente)
Comparação Modelo x Rede Neural

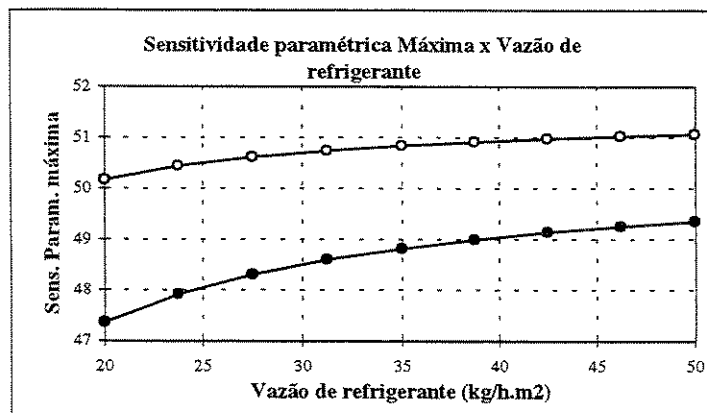
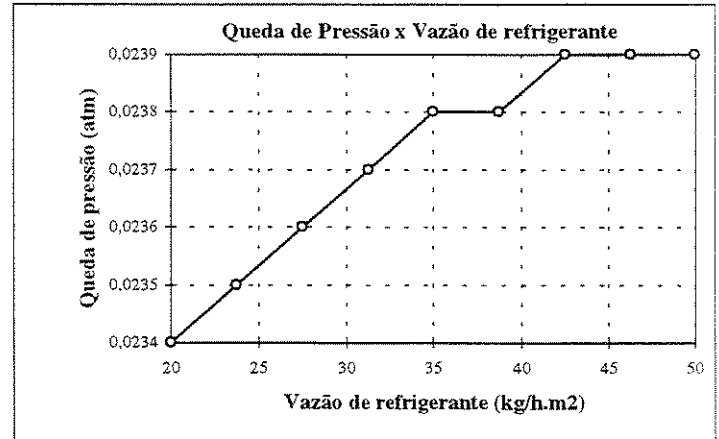
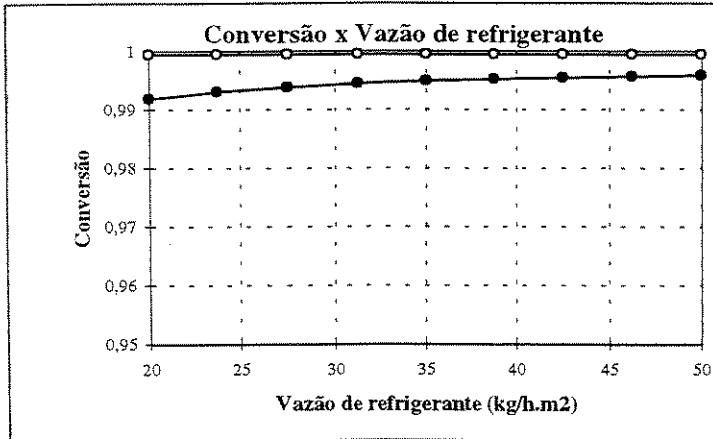
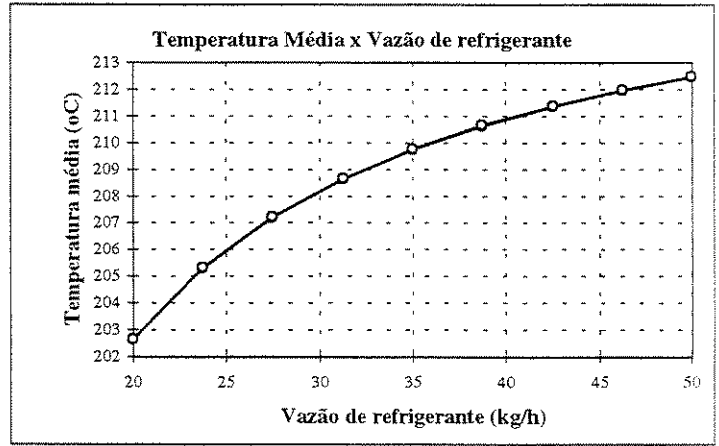
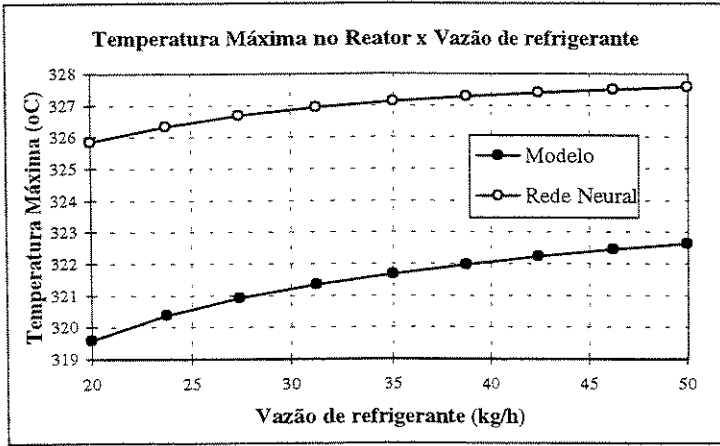


Figura 25: Estudo das Variáveis de Projeto - Diâmetro Interno do Reator (Configuração Contra-corrente)
Comparação Modelo x Rede Neural

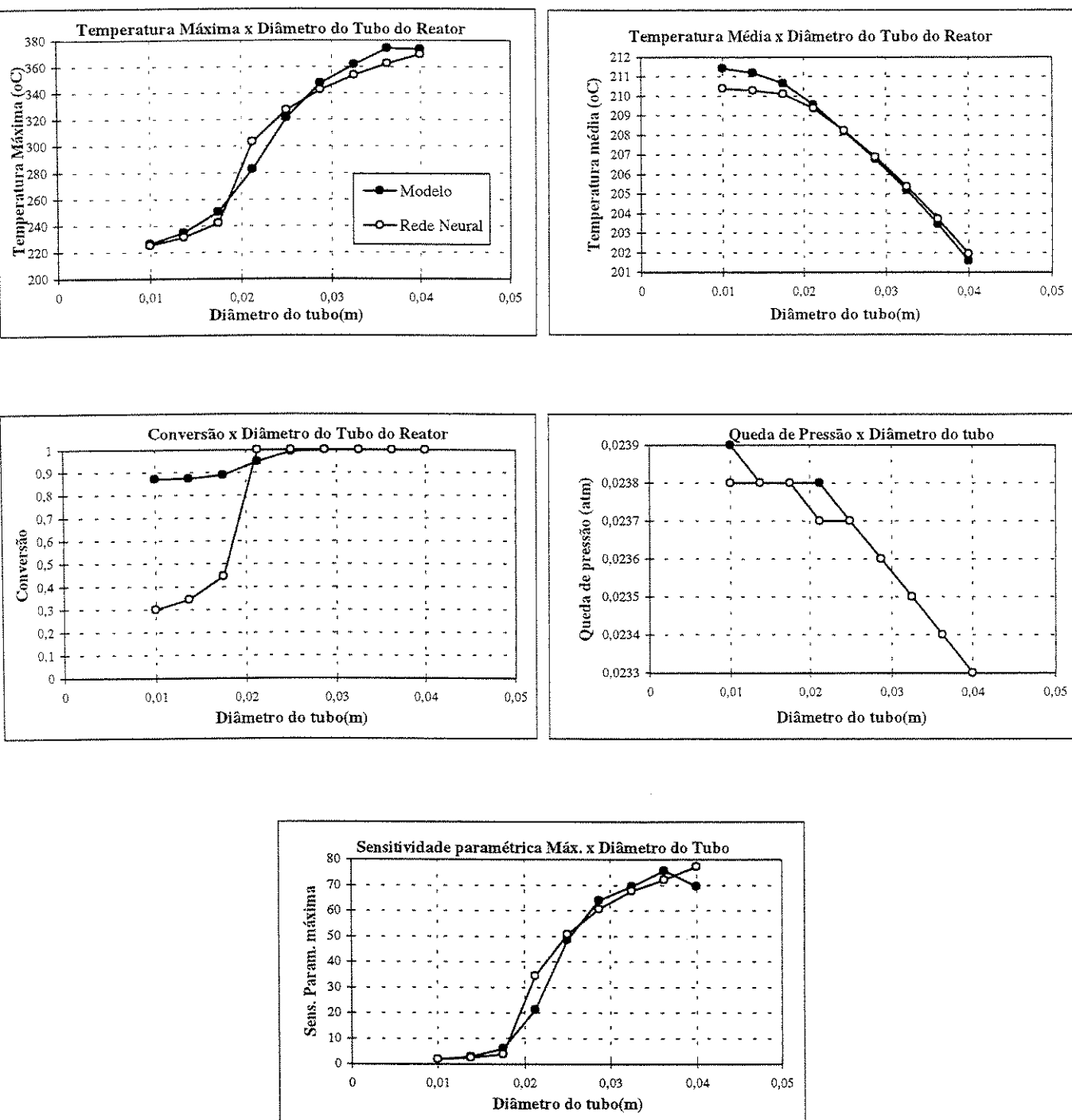


Figura 26: Estudo das Variáveis de Projeto - Diâmetro da Partícula de Catalisador (Configuração Contra-corrente)
Comparação Modelo x Rede Neural

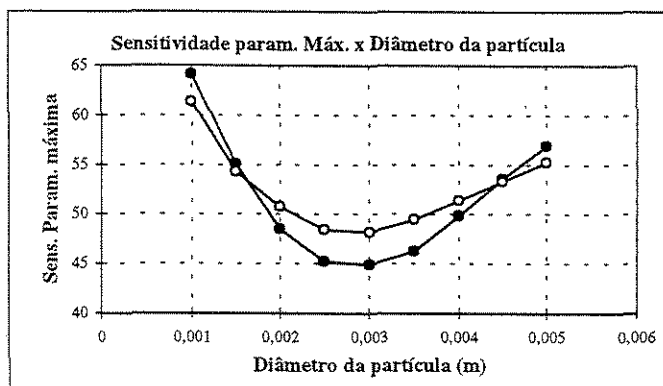
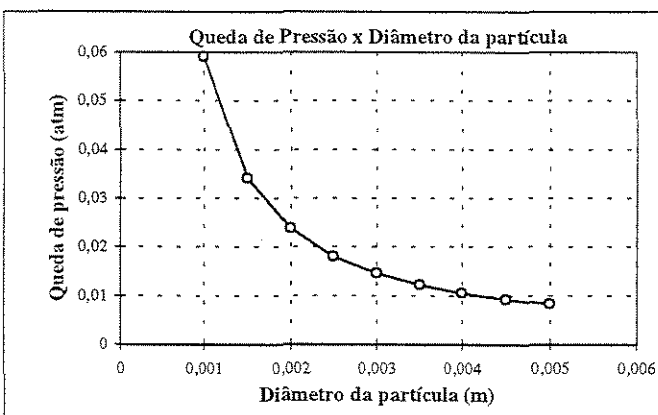
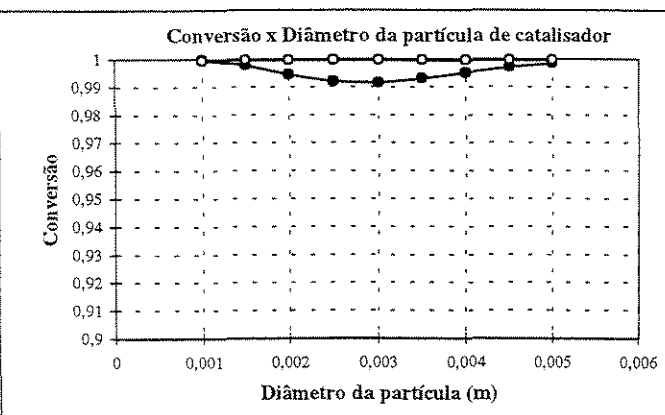
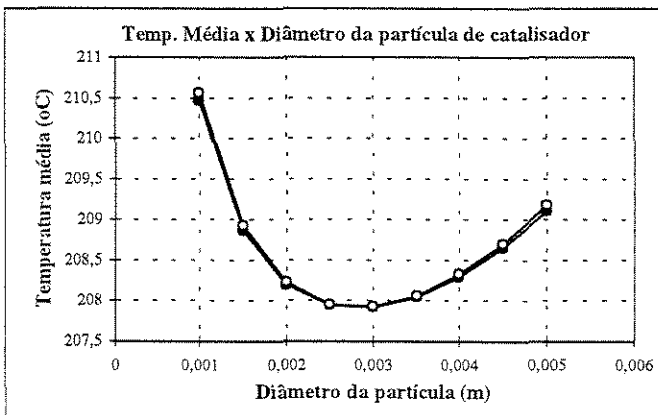
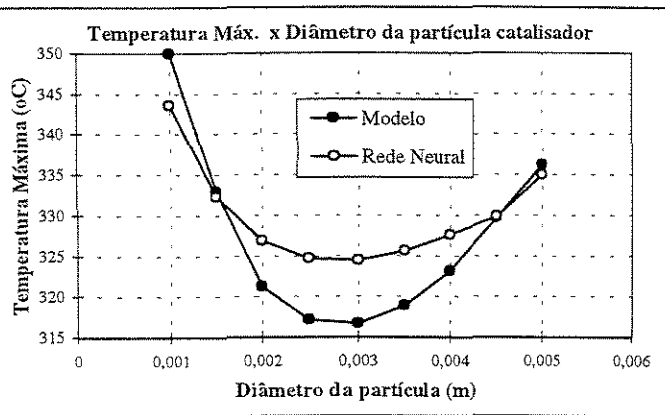
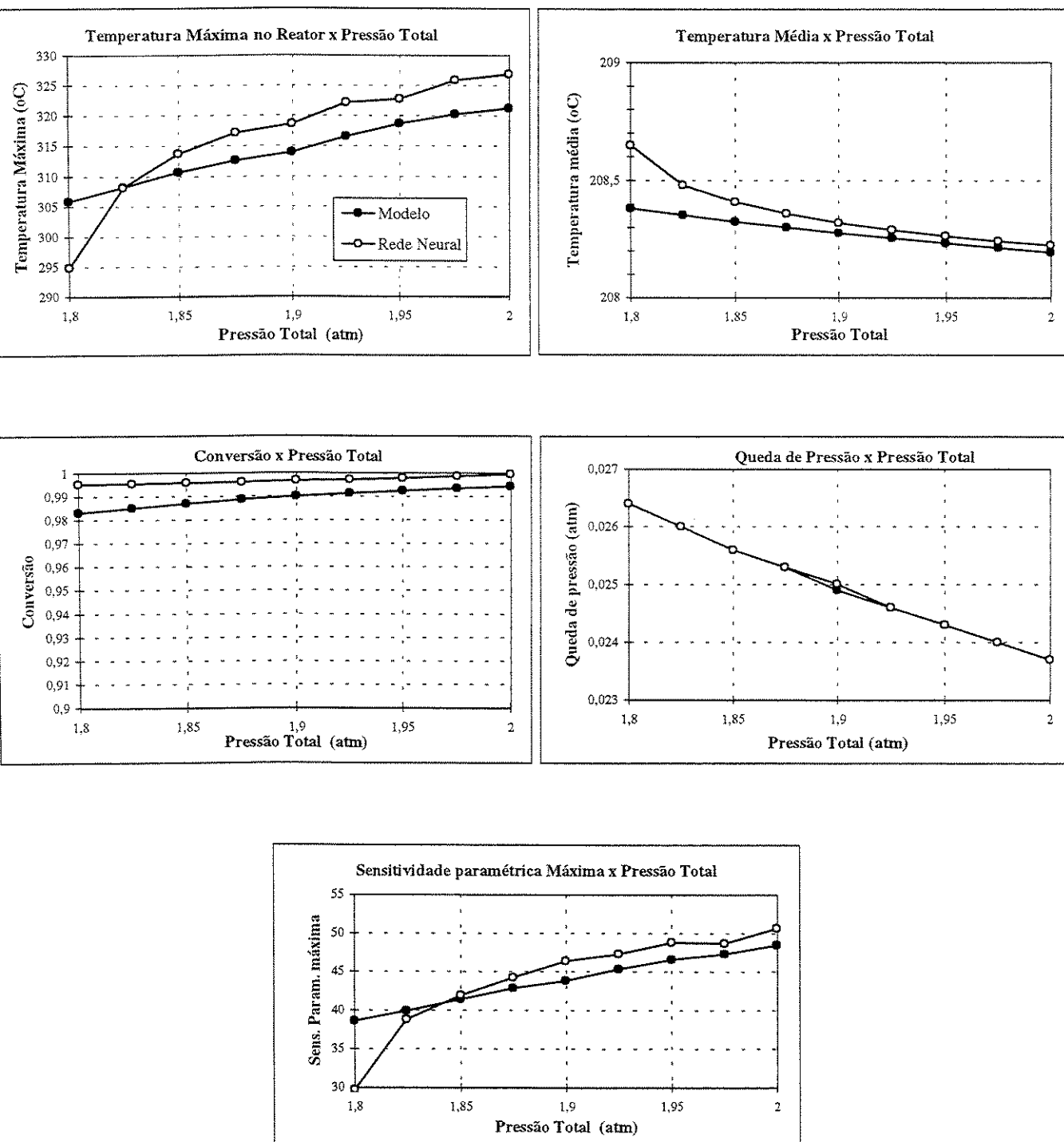


Figura 27: Estudo das Variáveis de Projeto - Pressão Total na Entrada (Configuração Contra-corrente)
 Comparação Modelo x Rede Neural



9.4. ANÁLISE DA SIMULAÇÃO

Após ter realizado o estudo das variáveis de operação e de projeto, o Sistema Especialista fornece os resultados da análise da simulação. As simulações foram feitas com o software baseado na rede neural (REDEREAT.FOR).

9.4.1. Configuração CO-CORRENTE

Inicialmente, o módulo de equilíbrio químico é acionado, fornecendo os dados apresentados na tabela 10 através de um arquivo texto. Nota-se que a produção de acetaldeído no caso simulado está muito próxima à produção na condição de equilíbrio.

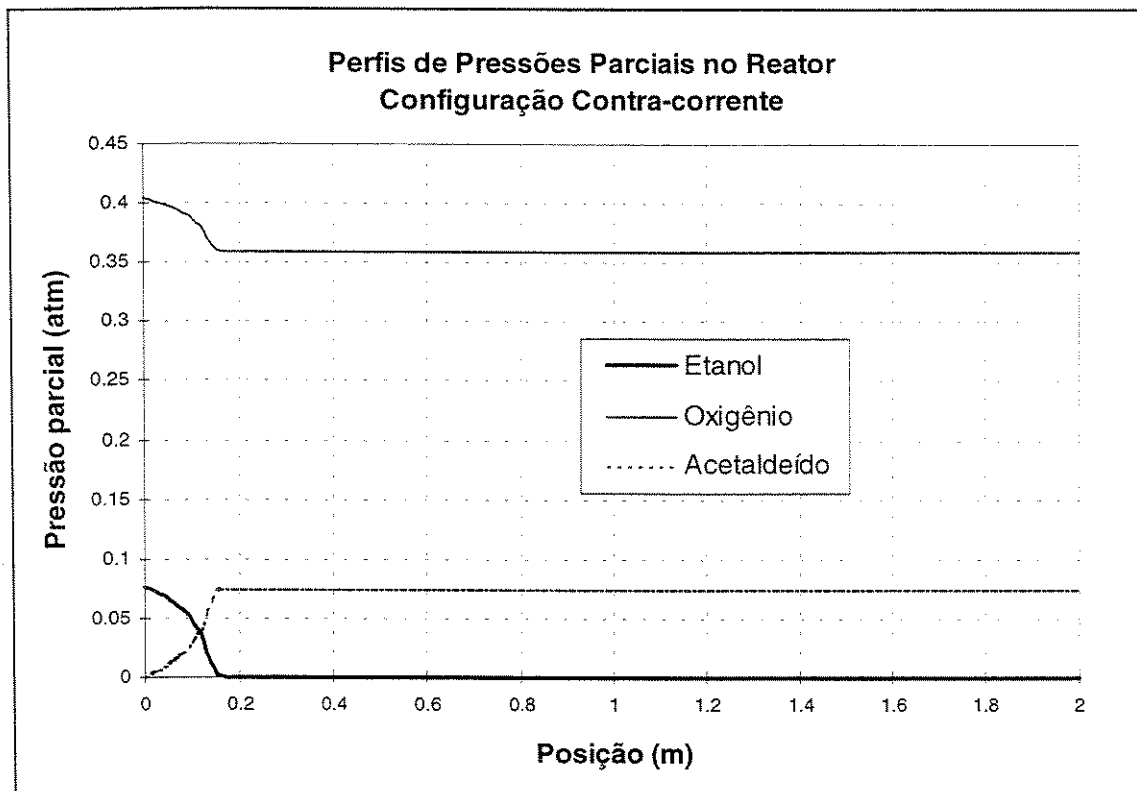
Tabela 10: Dados de equilíbrio - configuração co-corrente.

Parâmetro	Valor
Conversão de equilíbrio	0,999992
Conversão mínima especificada	0,98
Conversão à saída do reator (simulado)	0,9996
Constante de equilíbrio	$1.538355 \cdot 10^{20}$
Composição de equilíbrio à saída do reator (total = 100 %)	
Etanol	$2,88 \cdot 10^{-5}$
Oxigênio	17,92
Acetaldeído	3,77
Água	3,77
Nitrogênio	74,54
Produção de acetaldeído	
Condição de equilíbrio	moles/h
Simulado	2,559
Especificado	2,558

Em seguida, um resumo numérico da simulação é feito e gravado em arquivo (tabela 11). Os perfis de pressão parcial dos componentes também são calculados e foram apresentados na figura 28.

Tabela 11: Resumo numérico da simulação - configuração co-corrente.

Parâmetro	Valor	Unidade
Temperatura média	227,9	°C
Temperatura máxima	330,1	°C
Conversão de saída	0,9996	
Queda de pressão	0,0248	atm
Sensitividade paramétrica máxima	52	

**Figura 28:** Perfis de pressão parcial dos componentes - configuração co-corrente.

Após executar os módulos de estudo das variáveis de operação, o Sistema Especialista passa ao módulo de alarme. No caso estudado, o sistema detectou:

- a) a temperatura de auto-ignição de um dos componentes foi ultrapassada, no entanto, sem risco de explosão no reator (pois a concentração do produto não está dentro dos limites de flamabilidade);

- b) a queda de pressão para o caso simulado está abaixo da queda de pressão máxima permitida (alarme não é emitido);
- c) a conversão de saída do reator simulado está acima da conversão mínima especificada (alarme não é emitido). O sistema informa que a conversão mínima é atingida a 0,16 m da entrada do reator;
- d) a temperatura no reator está muito alta, provocando degradação do catalisador. Imediatamente, o Sistema Especialista parte para o módulo “Cálculo da condição de não degradação do catalisador”, solicitando ao usuário novos limites para a temperatura de entrada do reagente, vazão de reagentes e vazão de refrigerante. Novas simulações são realizadas para encontrar uma situação onde a temperatura máxima do reator seja inferior ao limite de degradação do catalisador.

O sistema encontrou a condição procurada, listada na tabela 12, juntamente com os dados numéricos da simulação com os parâmetros encontrados.

Tabela 12: Condição de não degradação do catalisador - configuração co-corrente.

Parâmetro	Valor	Unidade
Dados de Operação		
Temperatura de entrada dos gases	200	°C
Vazão de reagentes	30	kg/h.m ²
Vazão de refrigerante	4000	kg/h
Resultados da simulação		
Temperatura máxima	278,9	°C
Temperatura média	217,7	°C
Conversão final	0,958	
Queda de pressão	0,0242	
Sensitividade paramétrica máxima	28	

Conclui-se que o reator operado na configuração co-corrente pode atingir uma conversão alta (acima de 0,980), mas para isso a temperatura no reator será também muito alta causando degradação do catalisador na região do ponto quente. Para evitar a degradação é necessário reduzir a temperatura de entrada para 200 °C, trabalhando-se com uma conversão de saída mais

baixa (0,96). Pela análise da sensibilidade paramétrica máxima das tabelas 11 e 12, verifica-se que esta nova condição é cerca de 2 vezes mais estável em termos da variação da temperatura do reator em função da variação da temperatura do refrigerante.

Nos dois casos a queda de pressão foi praticamente a mesma, muito abaixo do limite máximo permitido. Não há problemas quanto a risco de explosão no reator em ambos os casos.

9.4.2. Configuração CONTRA-CORRENTE

Da mesma forma que para a configuração co-corrente, o sistema inicia-se com os cálculos do equilíbrio químico, fornecendo os dados apresentados na tabela 13. Novamente a produção de acetaldeído no caso simulado está muito próxima à produção na condição de equilíbrio.

A constante de equilíbrio calculada para este caso é diferente daquela determinada para o sistema co-corrente devido às diferenças na temperatura média no reator.

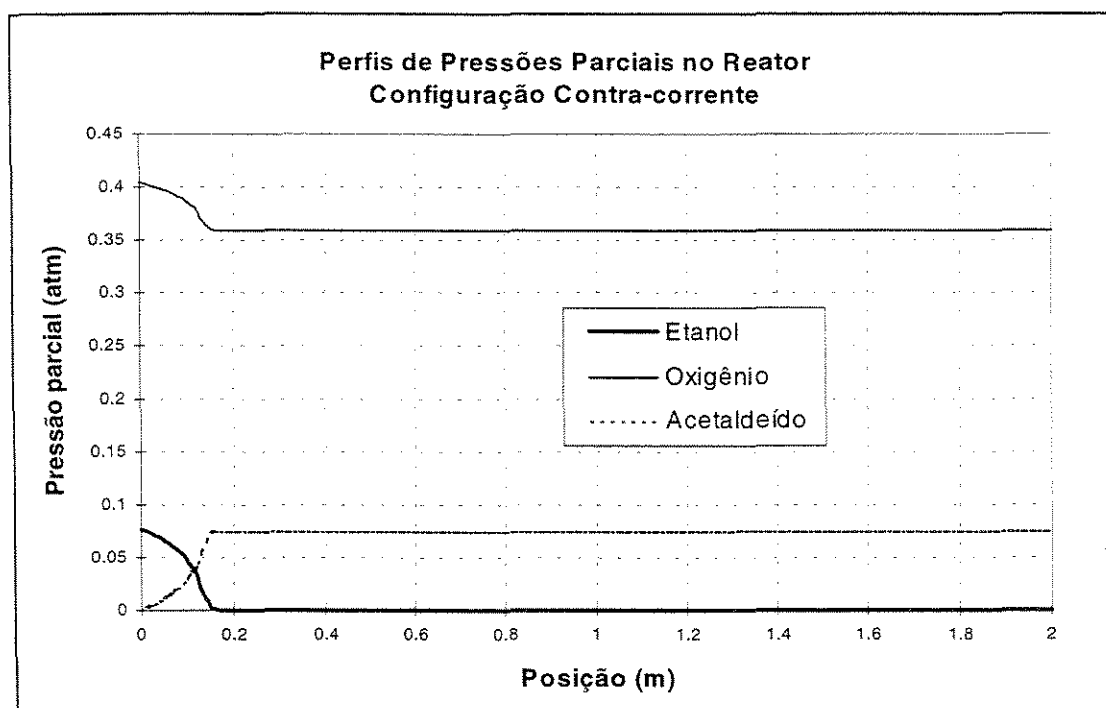
O resumo numérico da simulação é feito em seguida e os resultados encontram-se na tabela 14. Os perfis de pressão parcial dos componentes também são apresentados na figura 29.

Tabela 13: Dados de equilíbrio - configuração contra-corrente.

Parâmetro	Valor
Conversão de equilíbrio	0,999992
Conversão mínima especificada	0,980
Conversão à saída do reator (simulado)	0,9995
Constante de equilíbrio	$9.931768.10^{20}$
Composição de equilíbrio à saída do reator (total = 100 %)	(%, base molar)
Etanol	$2,88.10^{-5}$
Oxigênio	17,92
Acetaldeído	3,77
Água	3,77
Nitrogênio	74,54
Produção de acetaldeído	moles/h
Condição de equilíbrio	2,559
Simulado	2,558
Especificado	2,507

Tabela 14: Resumo numérico da simulação - configuração contra-corrente.

Parâmetro	Valor	Unidade
Temperatura média	208,2	°C
Temperatura máxima	326,8	°C
Conversão de saída	0,9995	
Queda de pressão	0,0237	atm
Sensitividade paramétrica máxima	51	

**Figura 29:** Perfis de pressão parcial dos componentes - configuração contra-corrente.

Para a configuração contra-corrente, o módulo de alarme detectou:

- a temperatura de auto-ignição de um dos componentes foi ultrapassada, no entanto, sem risco de explosão no reator (pois a concentração do produto não está dentro dos limites de flamabilidade);
- a queda de pressão para o caso simulado está abaixo da queda de pressão máxima permitida (alarme não é emitido);

- c) a conversão de saída do reator simulado está acima da conversão mínima especificada (alarme não é emitido). O sistema informa que a conversão mínima é atingida a 0,24 m da entrada do reator;
- d) a temperatura no reator está muito alta, provocando degradação do catalisador. Novamente o Sistema executou o módulo “Cálculo da condição de não degradação do catalisador”, solicitando ao usuário novos limites para a temperatura de entrada do reagente, vazão de reagentes e vazão de refrigerante. O sistema executou novas simulações e encontrou a condição procurada, listada na tabela 15, juntamente com os dados numéricos da simulação com os parâmetros encontrados.

Tabela 15: Condição de não degradação do catalisador - configuração contra-corrente.

Parâmetro	Valor	Unidade
Dados de Operação		
Temperatura de entrada dos gases	202	°C
Vazão de reagentes	4000	kg/h.m ²
Vazão de refrigerante	30	kg/h
Resultados da simulação		
Temperatura máxima	288,0	°C
Temperatura média	200,6	°C
Conversão final	0,940	
Queda de pressão	0,0232	
Sensitividade paramétrica máxima	35	

Conclui-se que o reator operado com configuração contra-corrente pode atingir uma conversão alta (acima de 0,990), mas para isso a temperatura no reator também será muito alta causando degradação do catalisador na região do ponto quente. Para evitar a degradação é necessário reduzir a temperatura de entrada para 202 °C, trabalhando-se com uma conversão de saída mais baixa (0,94).

Comparando-se os resultados das tabelas 12 e 15, verifica-se que é mais conveniente operar o reator de forma co-corrente para obter temperaturas abaixo do limite de degradação, uma vez que com esta configuração atinge-se uma condição de maior conversão final.

Pela análise da sensibilidade paramétrica máxima das tabelas 14 e 15, verifica-se que esta nova condição é também cerca de 1,5 vezes mais estável em termos da variação da temperatura do reator em função da variação da temperatura do refrigerante.

Nos dois casos a queda de pressão foi praticamente a mesma, muito abaixo do limite máximo permitido. Não há problemas quanto a risco de explosão no reator em ambos os casos.

9.5. UNIDADE DE SEPARAÇÃO

Após ter realizado a simulação principal e a execução do Sistema Especialista, o usuário poderá simular a unidade de separação, descrita anteriormente, utilizando o software comercial Hysim. Para tanto, deve-se apenas abrir o arquivo “*.SIM” pré-elaborado, e dar o comando de execução da simulação no Hysim.

Um pequeno programa foi incluído como uma operação externa do usuário, no Hysim, com a função de coletar os dados da simulação do reator (dados da corrente de saída do reator) e gravá-los em um arquivo de transferência com padrão pré-determinado pelo software comercial (userop.trn). Ao rodar a simulação no Hysim, este programa é primeiramente executado, atualizando os dados do arquivo de transferência, que são reconhecidos como uma corrente do Hysim. Com os dados atualizados da saída do reator, o restante da simulação é completada.

As informações contidas no arquivo de transferência (USEROP.TRN) são:

- ⇒ Temperatura da corrente;
- ⇒ Unidade de temperatura utilizada;
- ⇒ Pressão;
- ⇒ Unidade de pressão utilizada;
- ⇒ Tipo de fluxo (molar, mássico, volumétrico);
- ⇒ Fluxo;
- ⇒ Unidade de fluxo utilizada;
- ⇒ Fração molar dos componentes.

Os pacotes de propriedades termodinâmicas utilizados na simulação pelo Hysim foram o UNIQUAC^[26] para a fase líquida e o Soave-Redlich-Kwong^[26] para a fase vapor.

A figura 30 mostra a melhor opção encontrada entre as configurações estudadas para a unidade de separação, tendo como objetivo maximizar recuperação do acetaldeído, obtendo-se alto grau de pureza.

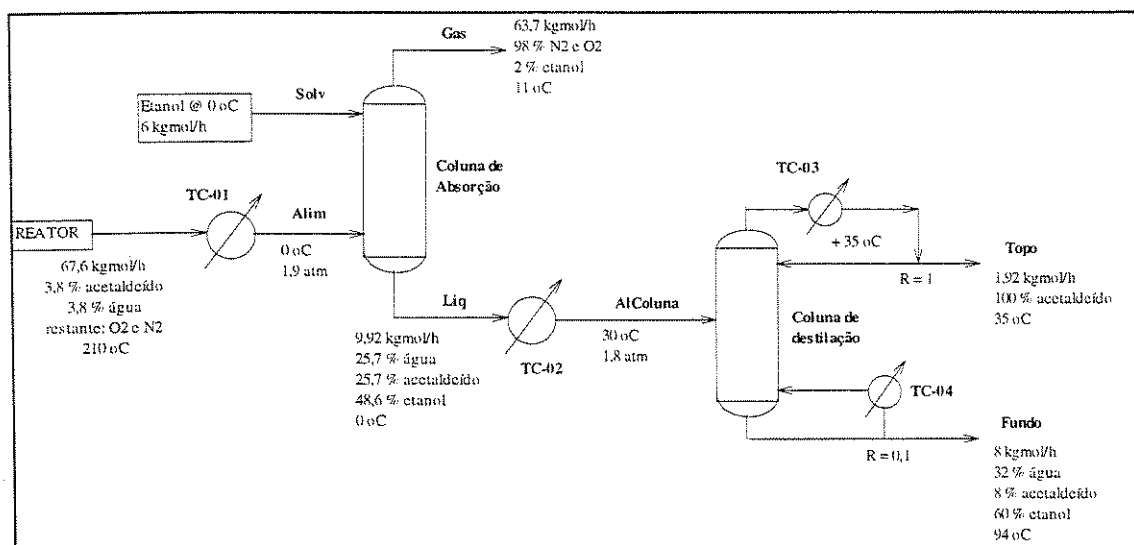


Figura 30: Esquema do sistema de separação do acetaldeído

A coluna de absorção^[27] contém 40 estágios teóricos, alimentada pelo fundo (1º estágio) com o efluente do reator resfriado a 0 °C e alimentada pelo topo (40º estágio) com o solvente (etanol) a 0 °C. A corrente gasosa efluente consiste basicamente de nitrogênio e oxigênio com pequena quantidade de vapor de etanol. A corrente líquida (rica em etanol) carrega todo o acetaldeído e a água, não apresentando oxigênio e nitrogênio dissolvidos. Para que a remoção do acetaldeído seja eficiente, é fundamental trabalhar com a coluna na temperatura indicada.

A corrente líquida deve ser aquecida a 30 °C e introduzida em uma coluna de destilação^[27] com 40 pratos teóricos (prato de alimentação: 25). O produto de fundo é rico em etanol e água e contém pequena quantidade de acetaldeído. O produto de topo contém acetaldeído com alto grau de pureza.

O etanol presente no produto de fundo da coluna pode ser recuperado através de destilação azeotrópica^[27] e reaproveitado no estágio de absorção, no entanto, este processo não será abordado neste trabalho. O rejeito energético também poderia ser aproveitado, por exemplo, cruzando as correntes de saída do reator e de saída da coluna de absorção (análise Pinch), ficando aqui uma sugestão para futuros trabalhos.

A recuperação do acetaldeído no processo de separação é de 75 %, correspondendo a 1,92 kgmol/h. Cerca de 0,64 kgmol/h são carregados com o produto de fundo da coluna.

As tabelas 16 a 20 mostram os resultados da simulação com o Hysim.

Tabela 16: Correntes associadas com a coluna de absorção

		Efluente do reator	Solvente	Corrente gasosa	Corrente líquida
Identificação		Alim	Solv	Gas	Liq
Fração de vapor	%	96,44	0	100	0
Temperatura	°C	0,0	0,0	11,7	0,2
Pressão	kPa	190	190	190	190
Vazão molar	kgmol/h	67,64	6,00	63,72	9,92
Vazão mássica	kg/h	1.959	276	1.855	380
Vazão volum.	L/h	2.283	347	2.160	470
Fluxo energia	MJ/h	430,67	-212,56	529,14	-310,71
Composição					
Acetaldeído	% mol	3,77	-	0,00	25,71
Etanol	% mol	0,00	100	1,85	48,58
Oxigênio	% mol	17,93	-	19,03	0,00
Nitrogênio	% mol	74,53	-	79,11	0,00
Água	% mol	3,77	-	0,00	25,71

Tabela 17: Correntes associadas com a coluna de destilação

		Alimentação	Produto de Topo	Produto de Fundo
Identificação		AlColuna	Topo	Fundo
Fração de vapor	%	0	0	63,63
Temperatura	°C	30,0	35,2	94,2
Pressão	kPa	185	185	185
Vazão molar	kgmol/h	9,92	1,92	8,00
Vazão mássica	kg/h	380	85	296
Vazão volum.	L/h	470	109	361
Fluxo energia	MJ/h	-275,88	-28,65	6,86
Composição				
Acetaldeído	% mol	25,71	100	7,86
Etanol	% mol	48,58	0,00	60,26
Oxigênio	% mol	0,00	0,00	0,00
Nitrogênio	% mol	0,00	0,00	0,00
Água	% mol	25,71	0,00	31,88

Tabela 18: Trocadores de calor/refervedores/condensadores

	TC-01	TC-02	TC-03	TC-04
Tipo	Resfriador	Aquecedor	Condensador	Refervedor
Corrente de entrada	Saída reator	Liq	-	-
Temperatura entrada	210 °C	0,2 °C	-	-
Corrente de saída	Alim	AlColuna	-	-
Temperatura saída	0 °C	30,0 °C	-	-
Troca térmica (MJ/h)	525,69	34,83	55,46	192,63

Tabela 19: Coluna de absorção

Número de estágios	40
Estágio da alimentação gasosa	40
Estágio de alimentação do solvente	1

Tabela 20: Coluna de destilação

Número de estágios	40
Estágio da alimentação	25
Razão de refluxo	1,0
Razão do reboiler	0,1

10. CONCLUSÕES

Neste trabalho foi apresentado um sistema de softwares baseado nos princípios de Engenharia Co-corrente, para simular um reator de leito fixo e realizar uma análise de seus resultados.

O simulador do reator foi desenvolvido em FORTRAN, utilizando algoritmos de redes neurais para estimar a taxa de reação a partir de valores de conversão, temperatura e pressão. Os conceitos de sensibilidade paramétrica também foram utilizados para quantificar a estabilidade térmica do reator.

O treinamento da rede neural é realizado através de um aplicativo em FORTRAN, também apresentado neste projeto.

O Sistema Especialista (C++) foi desenvolvido para coletar os resultados da simulação do reator, realizar automaticamente outras simulações e disponibilizar as informações processadas de uma forma facilmente compreensível. Deste modo, o aplicativo torna-se uma ferramenta para que os operadores possam tomar decisões mais rápidas e precisas ao determinar novas condições operacionais quando o processo é alterado; e também para auxiliar engenheiros no projeto de equipamentos mais eficientes e na determinação de políticas operacionais.

A unidade de separação dos produtos de reação também foi considerada, e sua simulação realizada no software comercial Hysim, utilizando informações do simulador do reator através de um arquivo de dados de transferência.

Como caso-estudo o sistema de softwares foi configurado para a reação de oxidação do etanol a acetaldeído sobre catalisador de Fe-Mo.

Os resultados (perfis de temperatura, pressão, conversão e sensibilidade paramétrica) apresentados pelo simulador desenvolvido com redes neurais foram comparados com os perfis

gerados pelo simulador contendo a equação da taxa, observando-se grande semelhança dentro das seguintes faixas de validade: 205 a 230 °C para a temperatura de entrada dos gases; 3000 a 4500 kg/h.m² para a vazão dos reagentes; 20 a 50 kg/h para a vazão de refrigerante; 25 a 40 mm para o diâmetro do reator; 1,5 a 2,5 mm e 4,0 a 5,0 mm para o diâmetro da partícula e de 1,8 a 2,0 atm para a pressão total.

A execução do Sistema Especialista foi demonstrada para um caso particular, com duas configurações de operação (co-corrente e contra-corrente), realizando-se um estudo das variáveis de operação e projeto e apresentando os alarmes emitidos pelo sistema.

No módulo de estudo de variáveis de operação e projeto foi realizada uma comparação entre os simuladores REATOR.FOR (modelo) e REDEREAT.FOR (rede neural). Os resultados foram apresentados na forma gráfica e verificou-se que houve semelhança nos valores calculados pelos programas dentro das faixas citadas acima.

Os gráficos gerados pelo Sistema Especialista são de grande utilidade para auxiliar na operação e projeto do reator. Suponha, por exemplo, que o fluxo de reagentes tenha que ser reduzido de 4.000 para 3.000 kg/h.m² devido a problemas de estoque. Após executar a simulação com as condições do reator, o operador tem em mãos os gráficos da figura 17, observando que a temperatura máxima no reator irá aumentar de 330 para 342 °C, a temperatura média irá cair de 228 para 225 °C, a queda de pressão irá cair de 0,025 para 0,015 atm; a sensibilidade paramétrica irá aumentar de 52 para 60 (o reator será menos estável) e não haverá alteração significativa na conversão. Com estas informações em mãos antes da modificação o operador poderá planejar as alterações necessárias no processo para manter as condições de performance e segurança do reator.

Sugestões para trabalhos futuros

As sugestões para futuros trabalhos são:

a) Ampliar os módulos do sistema especialista, englobando:

- estudo da degeneração do catalisador ao longo do tempo e ao longo do reator;
- análise dos valores de sensibilidade paramétrica máxima e definição de limites ótimos e seguros para operação do reator;
- métodos de otimização;

b) Completar a simulação do sistema de separação e troca térmica, realizando otimização energética (análise Pinch) e recuperação das correntes de sub-produtos (etanol + água);

c) Utilizar um modelo bi-dimensional para simulação do reator de leito fixo.

d) Otimizar a razão molar ar/etanol com o objetivo de reduzir a quantidade de gases (nitrogênio e oxigênio) na saída do reator, porém mantendo a conversão do reator dentro dos níveis desejados. Com isto, a recuperação do acetaldeído será facilitada, possibilitando trabalhar com maiores temperaturas na coluna de absorção (economia de energia).

e) Realizar o treinamento da rede neural utilizando dados industriais.

Em uma instalação industrial, há disponibilidade de informação da entrada e da saída do reator, mas para realizar o treinamento da rede, é necessário conhecer os dados do interior do reator, que normalmente não são medidos.

A proposta é realizar uma simulação do reator industrial utilizando uma equação da taxa simplificada, do tipo

$$r = K \cdot P_{O_2}^0 \cdot P_{etanol} \quad \text{onde} \quad K = K_0 \cdot \exp(-E_a/R \cdot T)$$

onde r é a taxa de reação, $P_{O_2}^0$ é a pressão parcial de oxigênio na entrada do reator, P_{etanol} é a pressão parcial pontual do etanol, K_0 é um parâmetro ajustável, E_a é a energia de ativação, R é a constante geral dos gases e T a temperatura pontual no reator.

Para cada condição de operação do reator industrial, realiza-se uma simulação ajustando-se os parâmetros K_0 e E_a (um valor inicial de E_a pode ser estimado pela termodinâmica) até que a conversão final, temperatura de saída e pressão de saída do reator simulado sejam iguais aos valores encontrados na instalação industrial.

Para uma nova condição de operação, os parâmetros K_0 e E_a são alterados para ajustar a nova simulação ao reator real.

Desta forma, após várias simulações para diferentes condições operacionais, obtém-se os perfis de temperatura, conversão, pressão e a taxa de reação calculada que serão utilizados para criar o conjunto de dados de treinamento da rede neural.

11. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Maciel Filho, R; McGreavy, C. Multitubular Reactor Design for Waste Minimization. *Trans. Inst. of Chem. Eng.*, v.71, part B, pp.208-214, 1993.
- [2] Moura, J.C. *Oxidação do Etanol a Acetaldeído sobre Catalisador de Cobre Oxidado*. Campinas, São Paulo, UNICAMP/FEQ/DEM, 1984, Tese de Doutorado.
- [3] Maciel Filho, R. *Oxidação Catalítica do Etanol a Acetaldeído sobre Catalisador de Óxido de Ferro-Molibdênio*. Campinas, São Paulo, UNICAMP/FEQ/DEQ, 1984, Tese de Mestrado.
- [4] Rodrigues, V.F. *Critérios de Estabilidade para Reatores de Leito Fixo*. Campinas, São Paulo, UNICAMP/FEQ/DPQ, 1994, Tese de Mestrado.
- [5] van Welsenaere, R.; Froment, G.F. Parametric Sensivity ans Runaway in Fixed Bed Catalytic Reactors. *Ch. Eng. Sci.*, v.25, p.1503, 1970.
- [6] Hosten, L.H.; Froment, G.F. Parametric Sensivity in Co-currently Cooled Tubular Reactors. *Ch. Eng. Sci.*, v.41, n.4, p.1073.
- [7] Borio, D.O.; Gatica, J.E.; Porras, J.A. Wall Cooled Fixed Bed Reactors: Parametric Sensivity as a Design Criterion. *AIChE J.*, v.35, n.2, p.287, 1989.
- [8] Maciel Filho, R.; Maciel, M.R.W.; Domingues, A.; Stinghen, A.O. Computer Aided Design of Acetaldehyde Plant With Zero Avoidable Pollution. *Computers chem. Engng.*, v.20, Suppl.,S1389-S1393, 1986.
- [9] McGravy, C.; Maciel filho, R. Influence of Flow Distribution on Heat Transfer in Multitubular Catalytic Reactors. In: *3rd Latin American Conf. on heat and Mass Transfer*, 1988, Guanajuato, México.

- [10] Maciel Filho, R. *Modelling and Control of Multitubular Reactors*. Leeds, Inglaterra, The University of Leeds, 1989, Tese de Doutorado.
- [11] Wang, X.Z.; Lu, M.L.; McGreavy, C. Design of an Operator Decision Support Environment for Crude Oil Distillation Unit. *ICHEME Symposium Series*, n. 133, pp.33-40.
- [12] Ignova, M; Paul, G.C.; Glassey, J.; Ward, A.C.; Montague, G.A.; Thomas, C.R.; Karim, M.N. Towards Intelligent Process Supervision: Industrial Penicillin Fermentation Case Study. *Computers chem. Engng.*, v.20, Suppl., S545-S550, 1996.
- [13] Mcgravy, C.; Wang, X.Z.; Lu, M.L.; Yang, S.H. Objects, Agents and Work Flow Modelling for Concurrent Engineering Process Design. *Computers chem. Engng.*, v.20, Suppl., S1167-S1172, 1996.
- [14] STEP - Manual do usuário.
- [15] "Introdução à Inteligência Artificial". Capítulo 11 do manual do usuário - Prolog.
- [16] Chabris, C.F. *Artificial Intelligence & Turbo Pascal*, 1a ed. Multiscience Press Inc., 1987.
- [17] Szücs, A.; Gerzon, M.; Hangos, K.M. An Intelligent Diagnostic System Based on Petri Nets. *Computers chem. Engng.*, v.20, Suppl., S635-S640, 1996.
- [18] Leone, H. A Knowledge-Based System for HAZOP Studies. *Computers chem. Engng.*, v.20, Suppl., S369-S374, 1996.
- [19] Wang, X.Z.; Yang, S.A.; Yang, S.H.; McGravy, C. The Application of Fuzzy Qualitative Simulation in Safety and Operability Assessment of Process Plants. *Computers chem. Engng.*, v.20, Suppl., S671-S676, 1996.

- [20] Bugaeva, L.M.; Beznosik, Y.A.; Statjukha, G.A.; Kvitka, A.A. An Application of Expert System to Choice, Simulation and Development of Gases Purification Process. *Computers chem. Engng.*, v.20, Suppl., S401-S406, 1996.
- [21] Wasserman, P.D. *Neural Computing: Theory and Practice*, 1^a ed. New York: Editora van Nostrand Reinhold, 1989.
- [22] Bhagat, P. An Introduction to Neural Nets. *Chemical Engineering Progress*, August, p.55, 1990.
- [23] Varma, A. Packed bed reactors. An overview in chemical reactors. *Am. Chem. Soc. Symp. Series*, n. 168, pp.279-286, 1981.
- [24] Ruggiero, M. A. G. e Lopes, V. L. R. *Cálculo Numérico - Aspectos Teóricos e Computacionais*, 1^a ed. Makron Books, 1988.
- [25] Mizrahi, V.V. *Treinamento em Linguagem C++*, 1^a ed. Makron Books, 1995.
- [26] Sandler, S.I. *Chemical and Engineering Thermodynamics*, 2^a ed. Wiley, 1989.
- [27] Treybal, R. E. *Mass-Transfer Operations*, 3^a ed. McGraw-Hill, 1981.
- [28] Berne, R. M. e Levy, M. N. *Fisiologia*, 2^a ed. Editora Guanabara, 1990.
- [29] Hiorns, A.G. e Coggon, L. The use of neural network modelling to determine the degree of misting based on pigment morphology. *TAPPI Proceedings*, p.175, 1998.